



# UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

## INSTITUTO DE QUÍMICA DE SÃO CARLOS



# Tutorial *Software Origin*<sup>®</sup>

Giorgio Gianini Morbioli

Prof. Dr. Álvaro José dos Santos Neto  
Prof. Dr. Emanuel Carrilho

São Carlos, 2014



# UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

## INSTITUTO DE QUÍMICA DE SÃO CARLOS

Análise Instrumental I  
SQM0415

### **Docentes**

Prof. Dr. Álvaro José dos Santos Neto  
Prof. Dr. Emanuel Carrilho

### **Estagiários PAE**

Fabiana Marques  
Giorgio Gianini Morbioli  
Luis Felipe Rodríguez Cabal

### **Monitora**

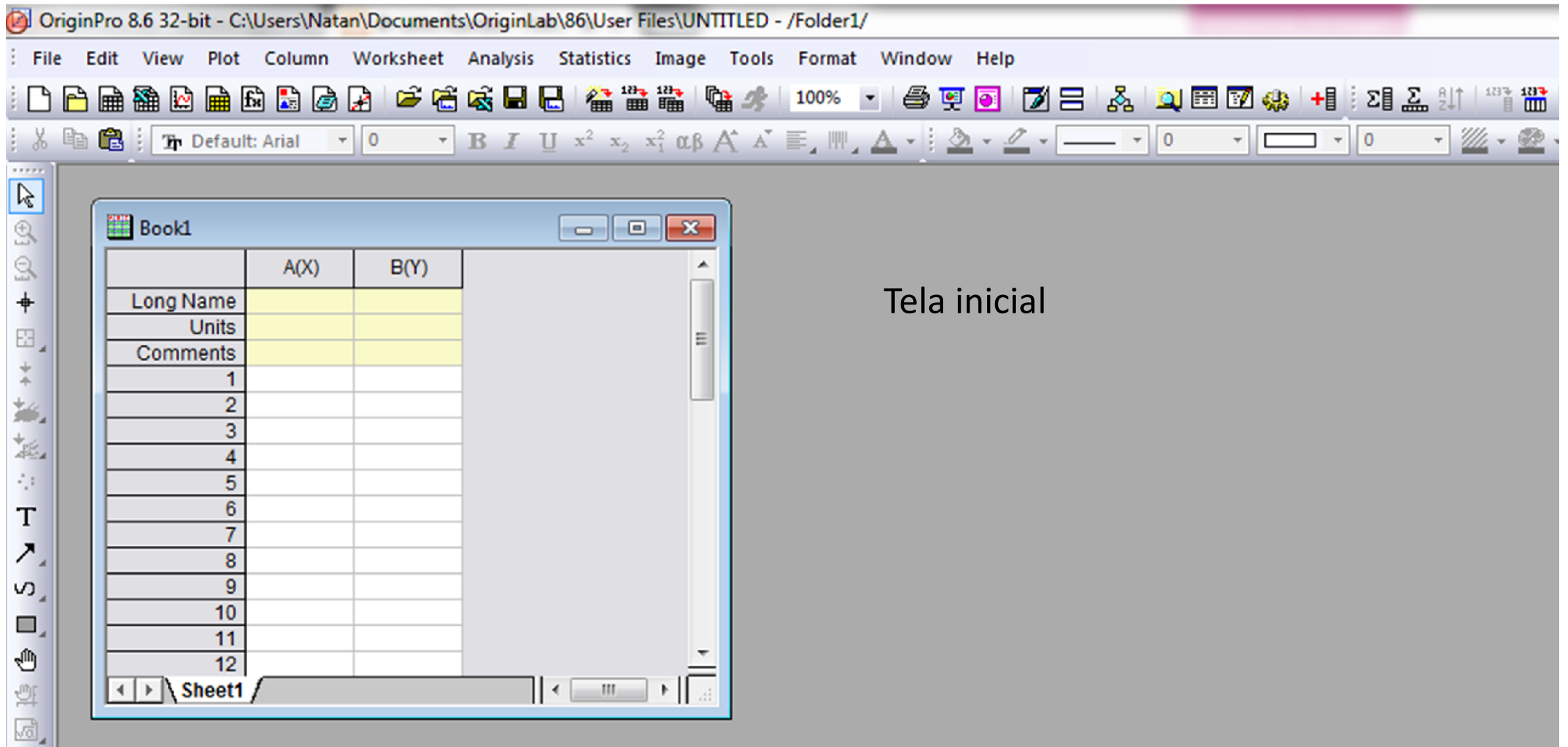
Gabriela Rizzo Piton

### **Técnica Responsável**

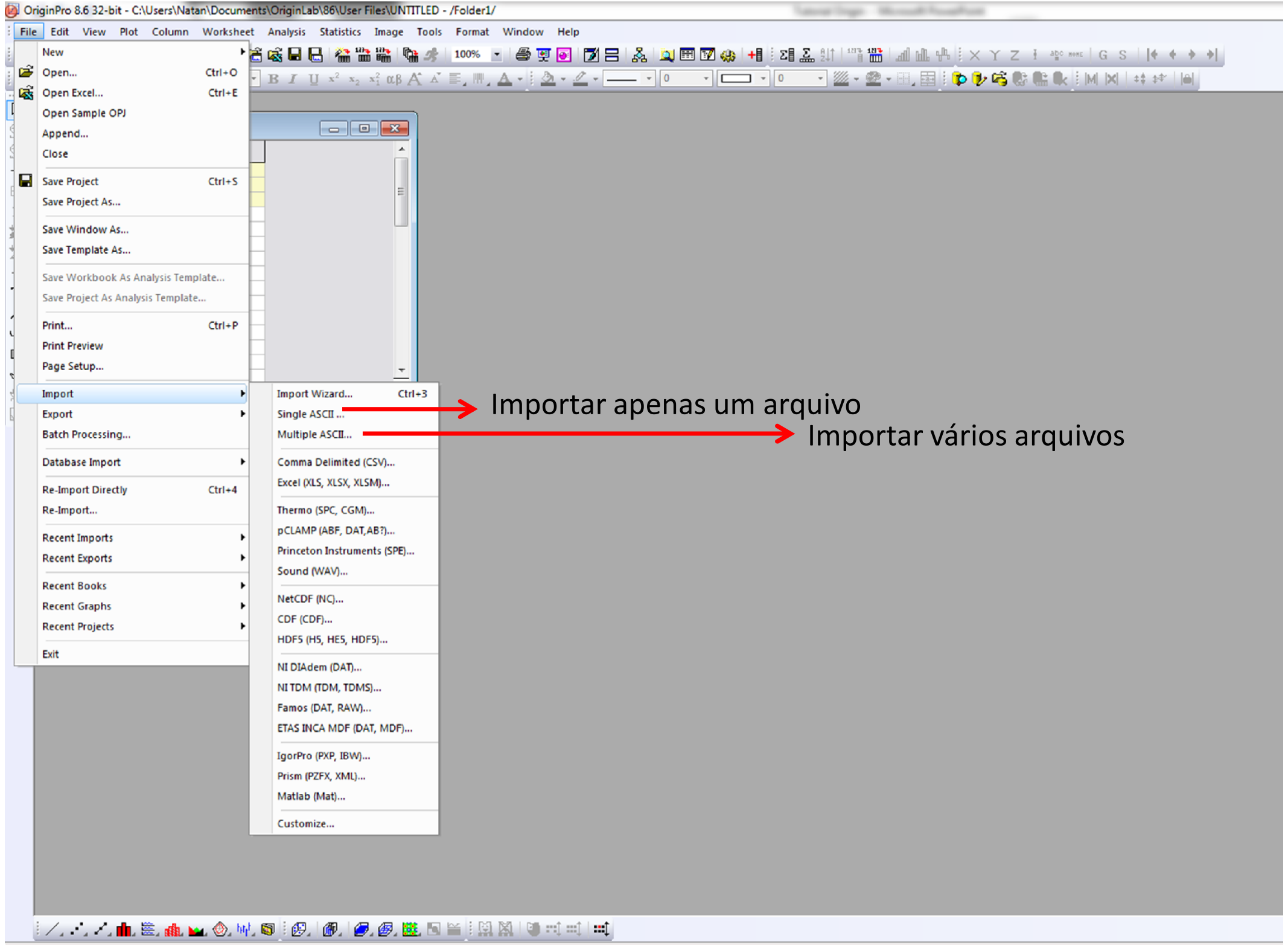
Yara Jaqueline Kerber Araújo

# Tutorial Origin

- Após obter o espectro no equipamento correspondente, salvar os arquivos .txt;
- Abrir o programa, e seguir as instruções;



Tela inicial

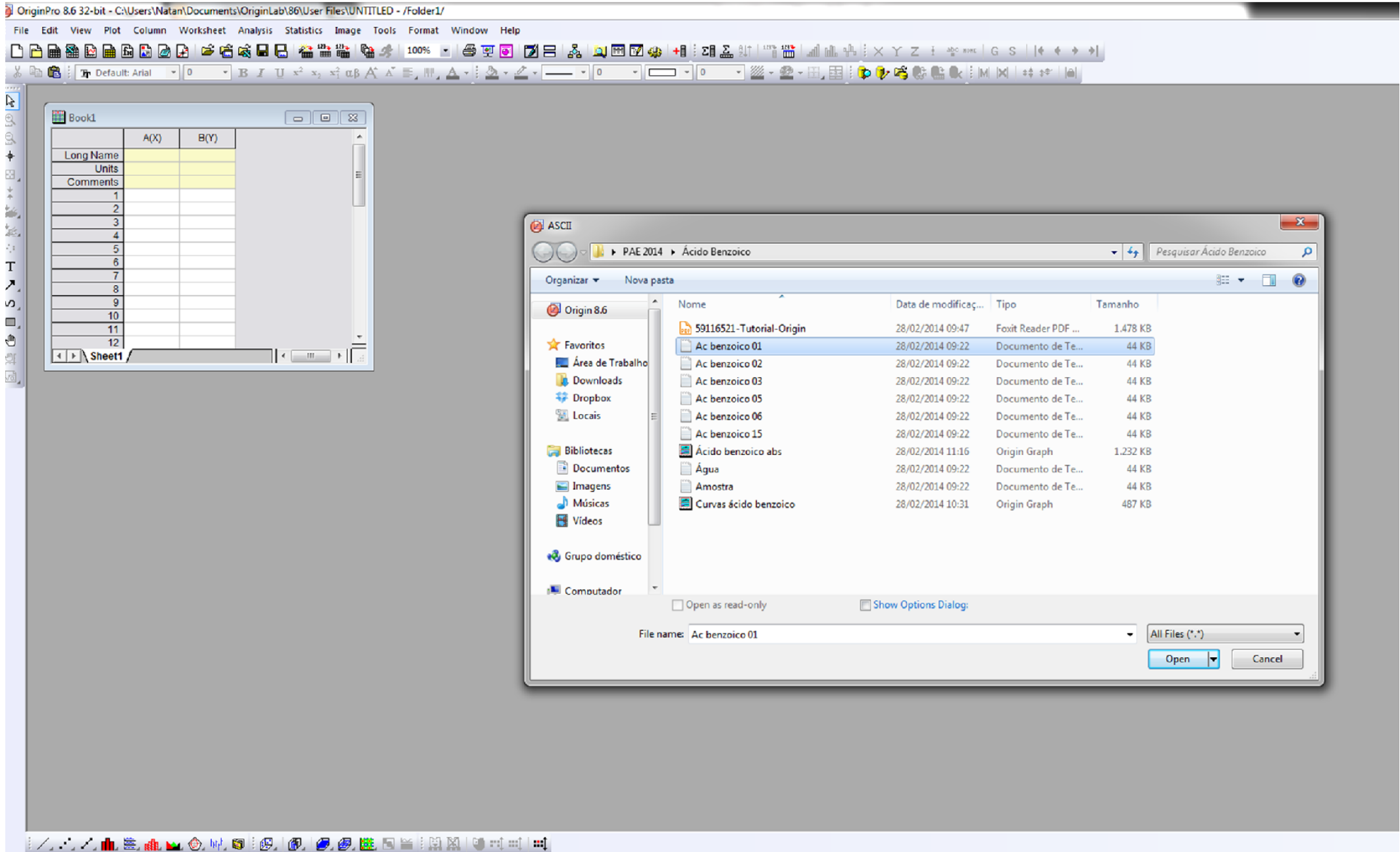


Importar apenas um arquivo

Importar vários arquivos



- Single ASCII
- Procure o arquivo correspondente, clique em **Open**



## ➤ Single ASCII

OriginPro 8.6 32-bit - CAUsers\Natan\Documents\OriginLab\86\User Files\UNTITLED \* - /Folder1/

File Edit View Plot Column Worksheet Analysis Statistics Image Tools Format Window Help

100%

Default: Arial 0 B I U x<sup>2</sup> x<sub>2</sub> x<sub>2</sub> αβ A A

Acbenzoico01 - Ac benzoico 01.txt

	A(X)	B(Y)
Long Name	##YUNITS=%T	
Units		
Comments		
Sparklines		
1	3.99265E8	7.65963E7
2	4.01194E8	7.55834E7
3	4.03123E8	9.83264E7
4	4.05051E8	9.90314E7
5	4.0698E8	9.97318E7
6	4.08909E8	1.0007E8
7	4.10838E8	9.933E7
8	4.12767E8	9.89169E7
9	4.14695E8	9.83716E7
10	4.16624E8	9.81688E7

Ac benzoico 01



- Multiple ASCII
- Procure os arquivos correspondentes, clique em **Add Files**

The screenshot displays the OriginPro 8.6 interface. On the left, a 'Book1' window shows a data table with columns A(X) and B(Y). The table has headers for 'Long Name', 'Units', and 'Comments', followed by rows numbered 1 to 12. On the right, an 'ASCII' dialog box is open, showing a file selection process. The 'Look in:' field is set to 'Ácido Benzoico'. The file list includes:

Nome	Data de modificaç...	Tipo
59116521-Tutorial-Origin	28/02/2014 09:47	Foxit Reac
Ac benzoico 01	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 02	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 03	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 05	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 06	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 15	28/02/2014 09:22	Documen
Ácido benzoico abs	28/02/2014 11:16	Origin Gra
Água	28/02/2014 09:22	Documen
Amostra	28/02/2014 09:22	Documen
Curvas ácido benzoico	28/02/2014 10:31	Origin Gra

The 'File name:' field contains '"Ac benzoico 06.txt" "Ac benzol'. The 'Files of type:' dropdown is set to 'All Files (\*.\*)'. The 'Add File(s)' button is highlighted. Below the dialog, the 'Show Options Dialog:' checkbox is checked, and an empty table with columns 'File Name', 'Size', and 'Modified' is visible.

- Multiple ASCII
- Clique em **OK**

OriginPro 8.6 32-bit - C:\Users\Natan\Documents\OriginLab\86\User Files\UNTITLED - /Folder1/

File Edit View Plot Column Worksheet Analysis Statistics Image Tools Format Window Help

100%

Default: Arial 0

Book1

	A(X)	B(Y)
Long Name		
Units		
Comments		
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		

Sheet1

ASCII

Look in: Ácido Benzoico

Nome	Data de modificaç...	Tipo
59116521-Tutorial-Origin	28/02/2014 09:47	Foxit Reac
Ac benzoico 01	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 02	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 03	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 05	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 06	28/02/2014 09:22	Documen
Ac benzoico 15	28/02/2014 09:22	Documen
Ácido benzoico abs	28/02/2014 11:16	Origin Gra
Água	28/02/2014 09:22	Documen
Amostra	28/02/2014 09:22	Documen
Curvas ácido benzoico	28/02/2014 10:31	Origin Gra

File name: co.03.txt "Ac benzoico 05.txt" Add File(s) OK

Files of type: All Files (\*.\*) Remove File(s) Cancel

Show Options Dialog:

File Name	Size	Modified
Ac benzoico 01.txt	43KB	02/28/14 9:22
Ac benzoico 02.txt	44KB	02/28/14 9:22
Ac benzoico 03.txt	43KB	02/28/14 9:22
Ac benzoico 05.txt	43KB	02/28/14 9:22
Ac benzoico 06.txt	43KB	02/28/14 9:22



- Multiple ASCII
- Clique em **OK**

The screenshot displays the OriginPro 8.6 32-bit interface. The main window shows a spreadsheet titled 'Book1' with columns A(X) and B(Y). The rows are labeled 'Long Name', 'Units', 'Comments', and numbered 1 through 12. The 'Long Name', 'Units', and 'Comments' rows are highlighted in yellow.

An 'Import and Export: impASC' dialog box is open in the foreground. The dialog has the following settings:

- Dialog Theme: [Empty]
- Description: Import ASCII file/files
- Results Log Output: [Empty]
- File Name: C:\Users\Natan\Desktop\PAE 2014\Ácido Benzoico\Ac... (with a dropdown arrow)
- File Info: [Expanded]
- Import Options:
  - Add Sparklines: Yes(if less than 50 columns)
  - Import Mode: Replace Existing Data
  - Template Name: [Empty]
  - File Structure: [Expanded]
  - Columns: [Expanded]
  - Header Lines: [Expanded]
  - (Re)Naming Worksheet and Workbook: [Expanded]
  - Partial Import: [Expanded]
  - Miscellaneous: [Expanded]
- Output: [Book1]Sheet1![1]:[0]

Buttons for 'OK' and 'Cancel' are visible at the bottom right of the dialog box.





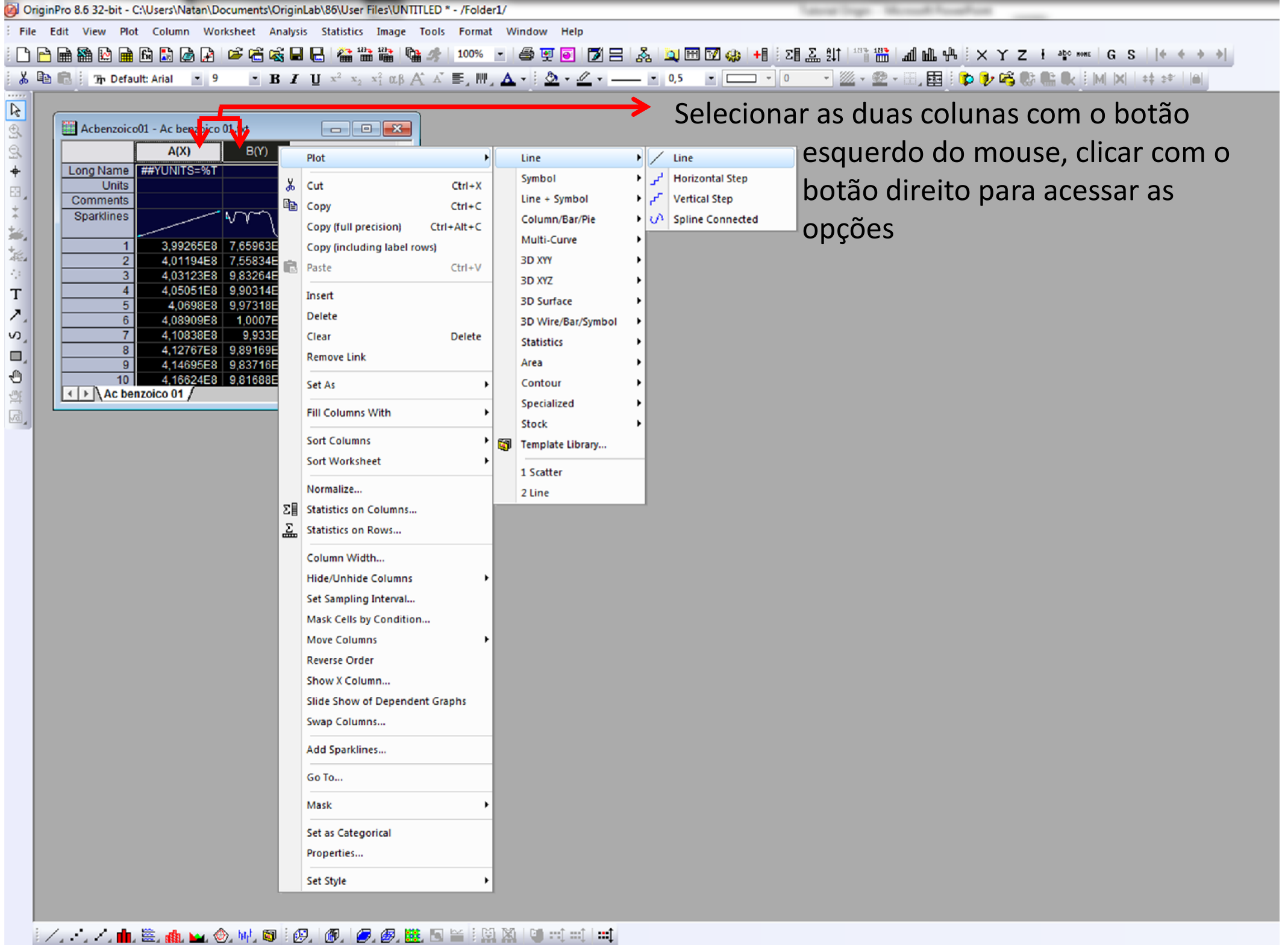
- Cada Workbook é referente a um espectro, e pode ser tratado individualmente.
- Para deixar a tela menos cheia, vamos operar apenas com um Workbook.
- Para vários Workbooks, o procedimento é o mesmo.

The screenshot displays the OriginPro 8.6 32-bit software interface. The main window shows a data table with columns A(X) and B(Y). A 'Sparklines' section in the table provides a small plot of the data. The table data is as follows:

	A(X)	B(Y)
Long Name	##YUNITS=%T	
Units		
Comments		
Sparklines		
1	3,99265E8	7,65963E7
2	4,01194E8	7,55834E7
3	4,03123E8	9,83264E7
4	4,05051E8	9,90314E7
5	4,0698E8	9,97318E7
6	4,08909E8	1,0007E8
7	4,10838E8	9,933E7
8	4,12767E8	9,89169E7
9	4,14695E8	9,83716E7
10	4,16624E8	9,81688E7

Transmitância

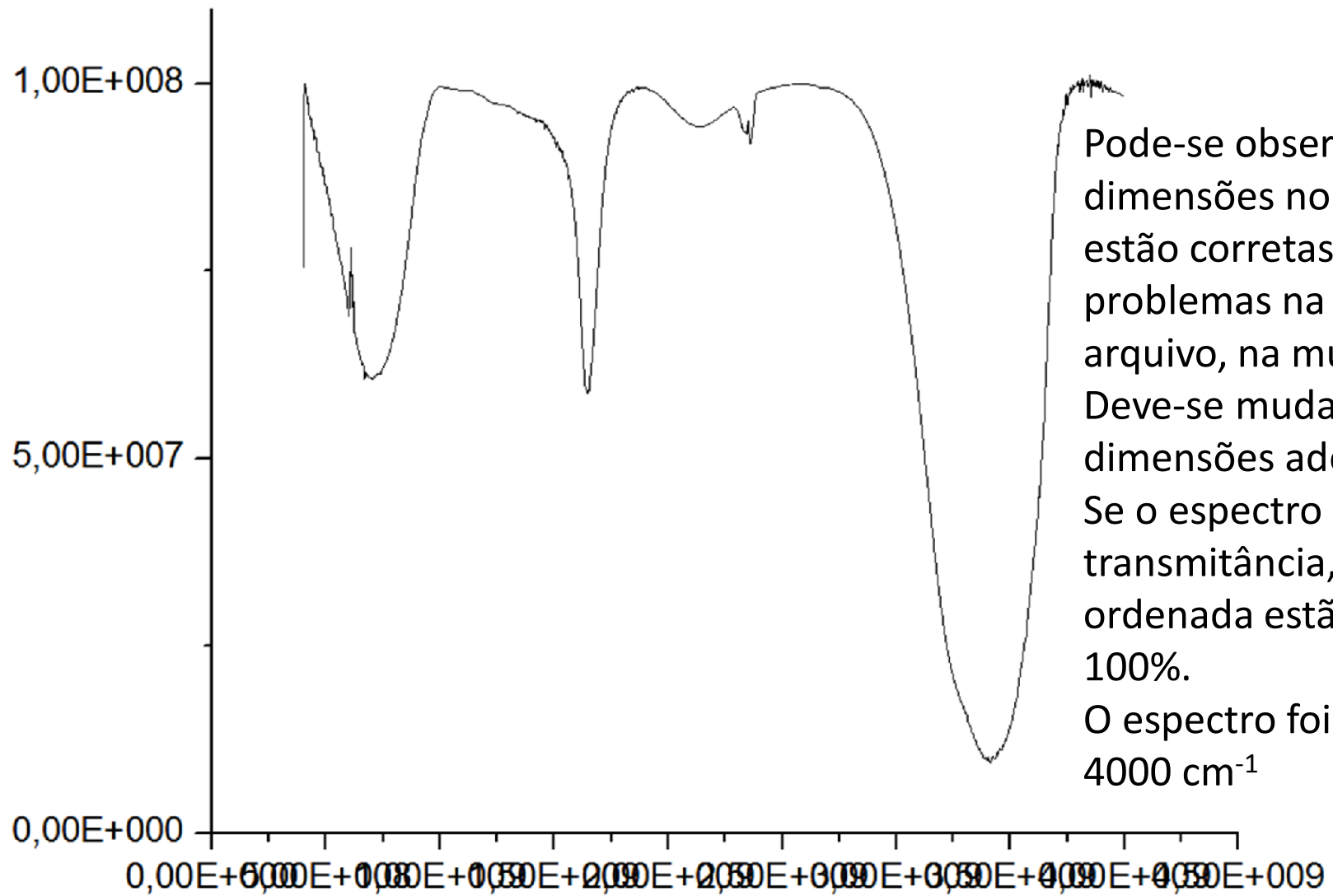








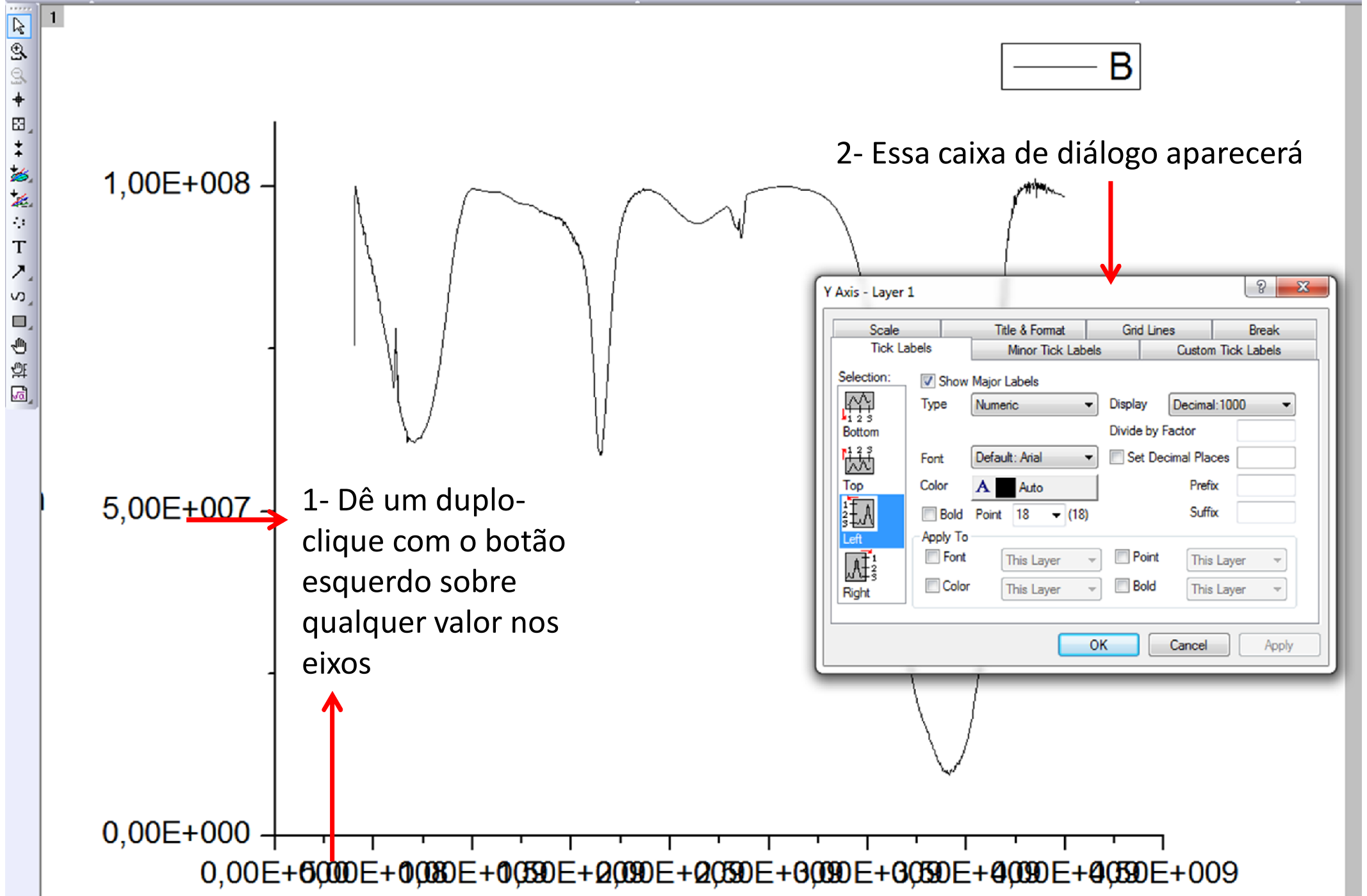
— B



##YUNITS=%T

Pode-se observar que as dimensões no gráfico não estão corretas. Isso é devido a problemas na conversão do arquivo, na mudança . →, Deve-se mudar para as dimensões adequadas: Se o espectro está em transmitância, os valores da ordenada estão entre 0 e 100%. O espectro foi obtido de 400 a 4000 cm<sup>-1</sup>





1,00E+008

5,00E+007

0,00E+000

0,00E+000 0,10E+009 0,20E+009 0,30E+009 0,40E+009 0,50E+009

B

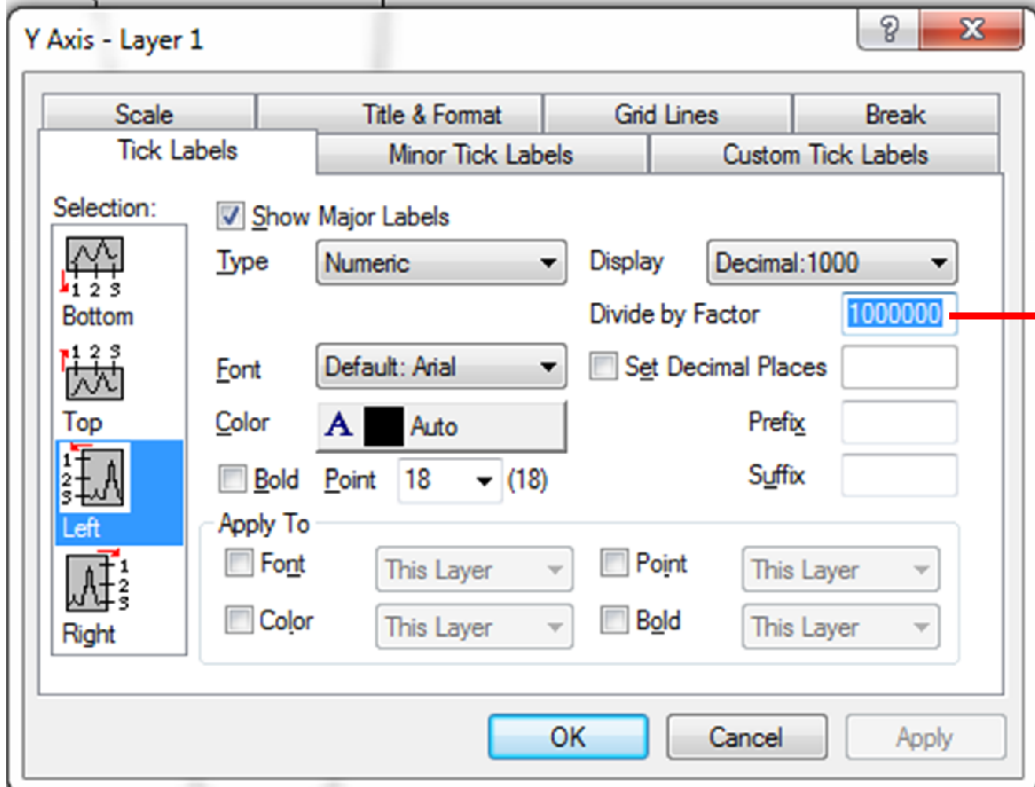
2- Essa caixa de diálogo aparecerá

1- Dê um duplo-clique com o botão esquerdo sobre qualquer valor nos eixos

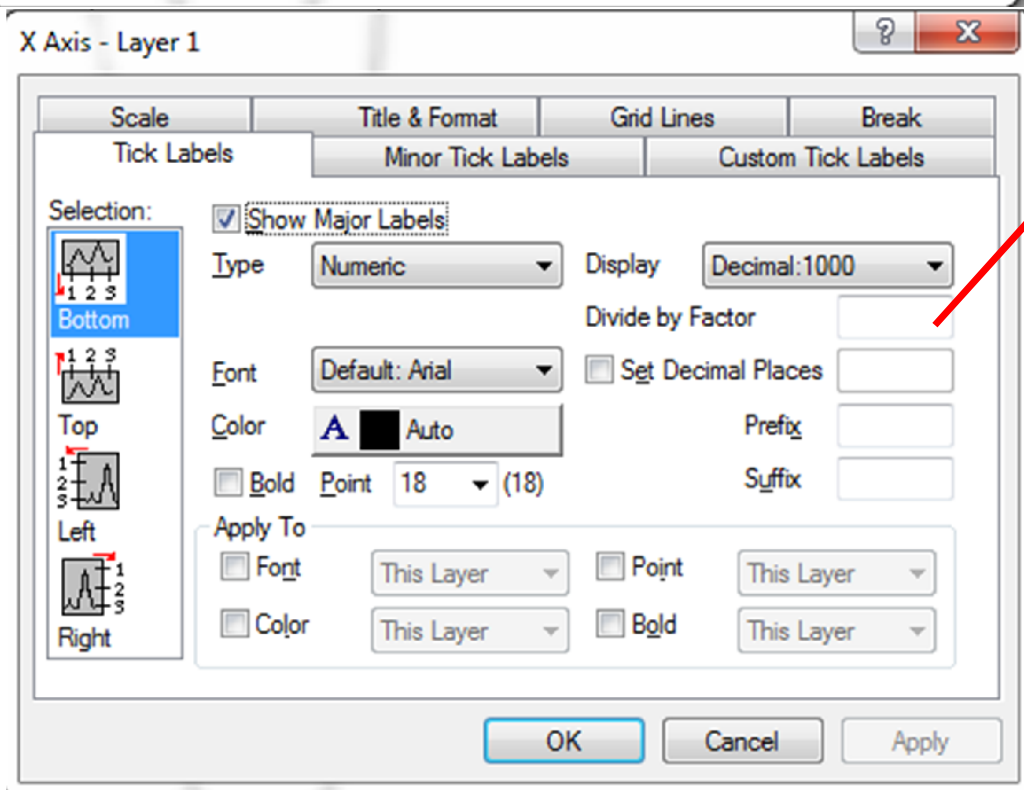
Y Axis - Layer 1

Scale	Title & Format	Grid Lines	Break
Tick Labels		Minor Tick Labels	Custom Tick Labels
Selection: <input checked="" type="checkbox"/> Show Major Labels			
Type	Numeric	Display	Decimal:1000
Font	Default: Arial	Divide by Factor	
Color	Auto	Set Decimal Places	
Apply To	This Layer	Point	This Layer
	This Layer	Bold	This Layer

OK Cancel Apply

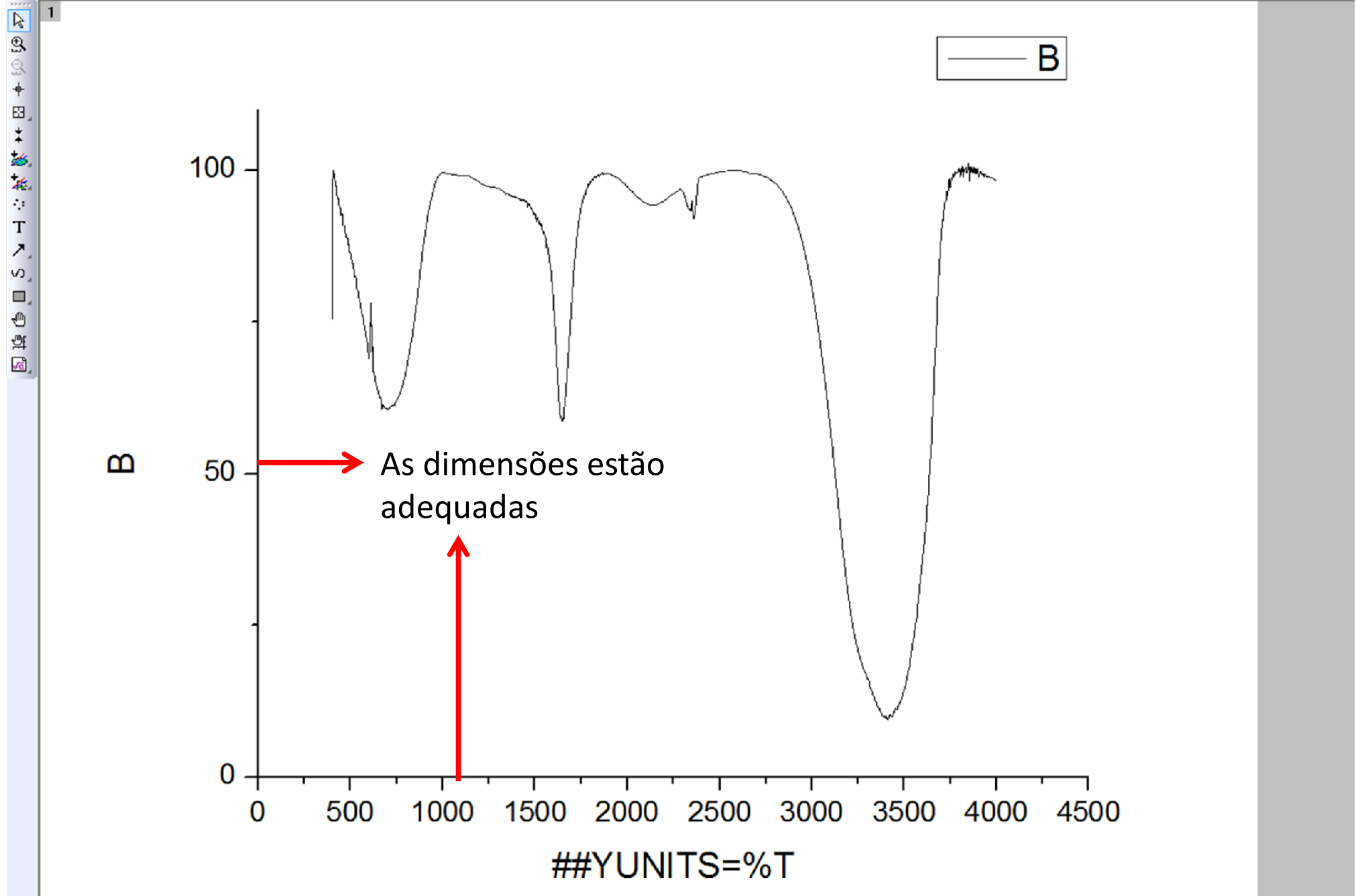


Digitar o valor pelo qual se deseja dividir os valores no eixo.  
Para o eixo Y, esse valor será de 1000000, nesse caso em específico.



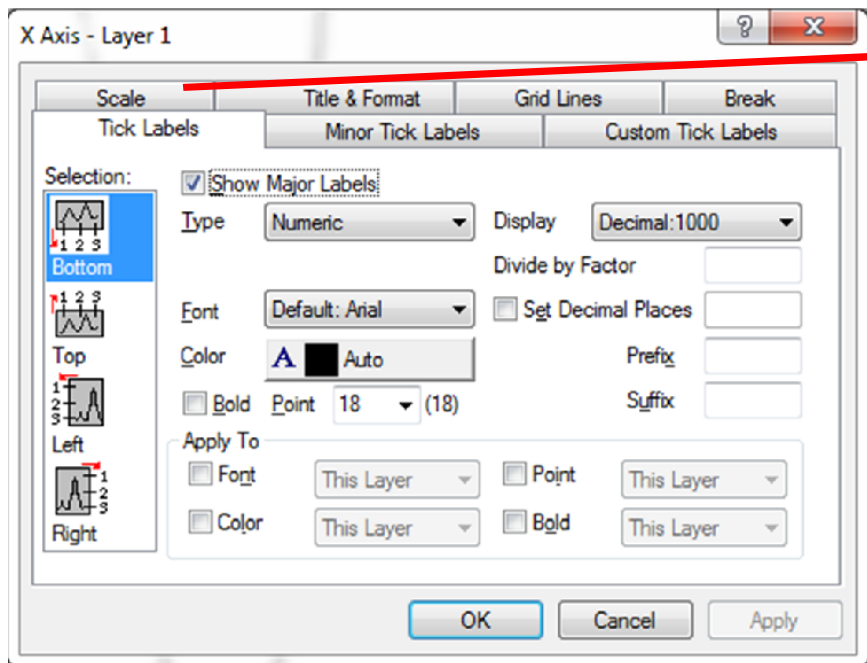
Digitar o valor pelo qual se deseja dividir os valores no eixo.  
Para o eixo X, esse valor será de 1000000, nesse caso em específico.

Clique em **Apply** após ambas operações.

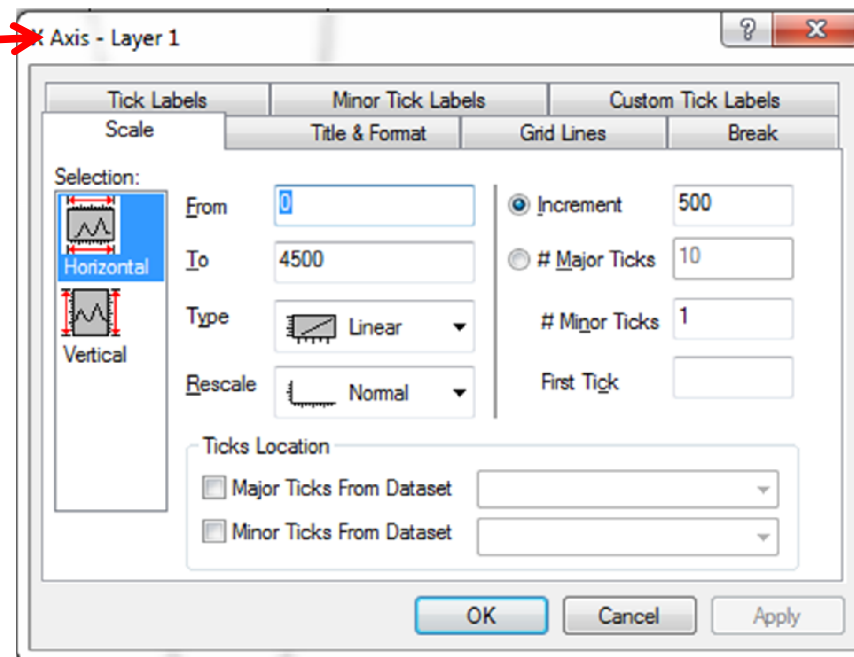


- É usual representar-se em um espectro de FTIR os números de onda do maior para o menor, e somente na região de varredura (no caso, de 400 a 4000  $\text{cm}^{-1}$ )

Abra novamente esta caixa de diálogo

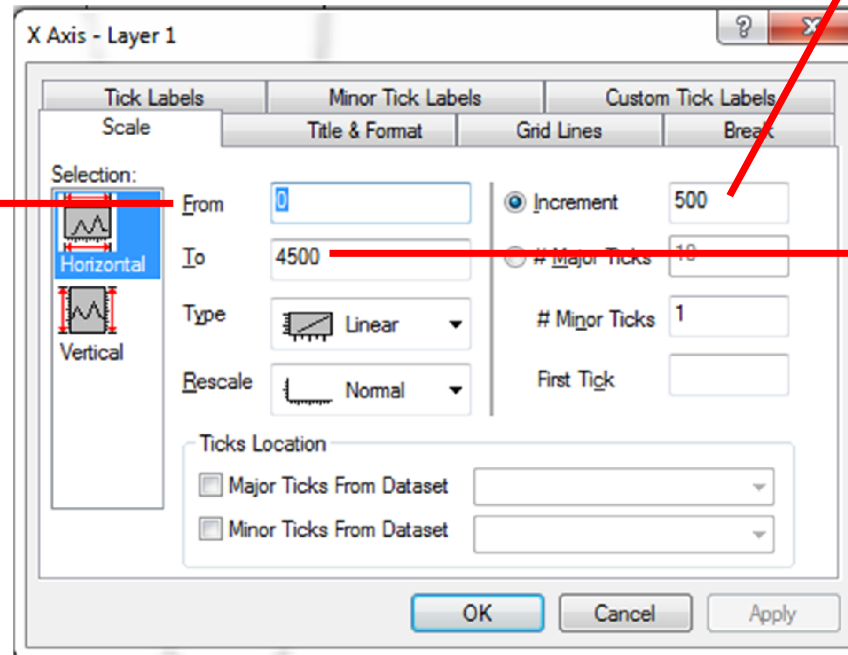


Clique em **Scale**



➤ Para o eixo X

Valor no qual seu espectro começa. Se a varredura foi de 400 a 4000  $\text{cm}^{-1}$ , e deseja-se representar do maior número de onda para o menor, então digite o valor desejado, ou seja, 4000



Incrementos de número de onda representados no espectro (de 500 em 500)

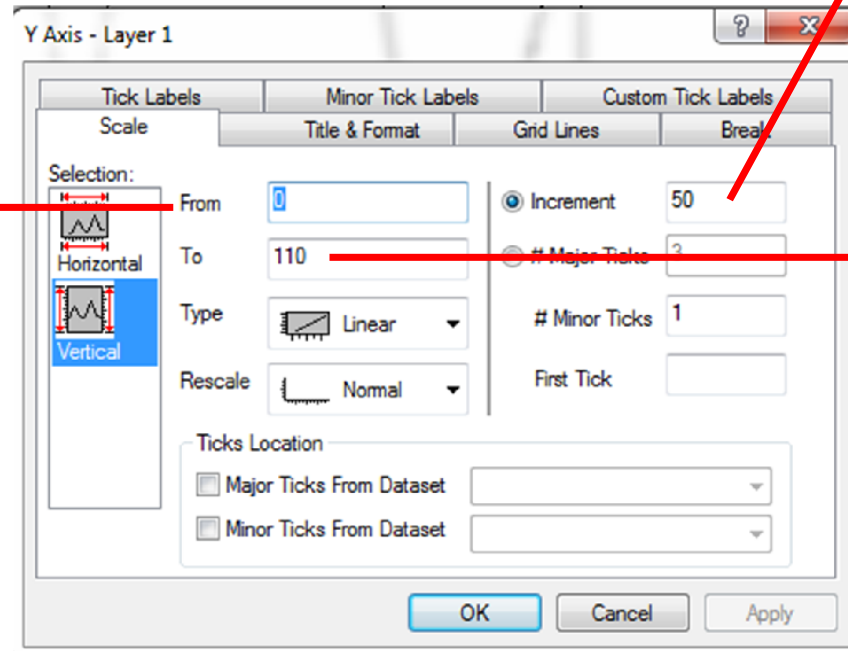
Valor no qual seu espectro termina. Se a varredura foi de 400 a 4000  $\text{cm}^{-1}$ , e deseja-se representar do maior número de onda para o menor, então digite o valor desejado, ou seja, 400

Após as modificações, clique em **Apply**



➤ Para o eixo Y

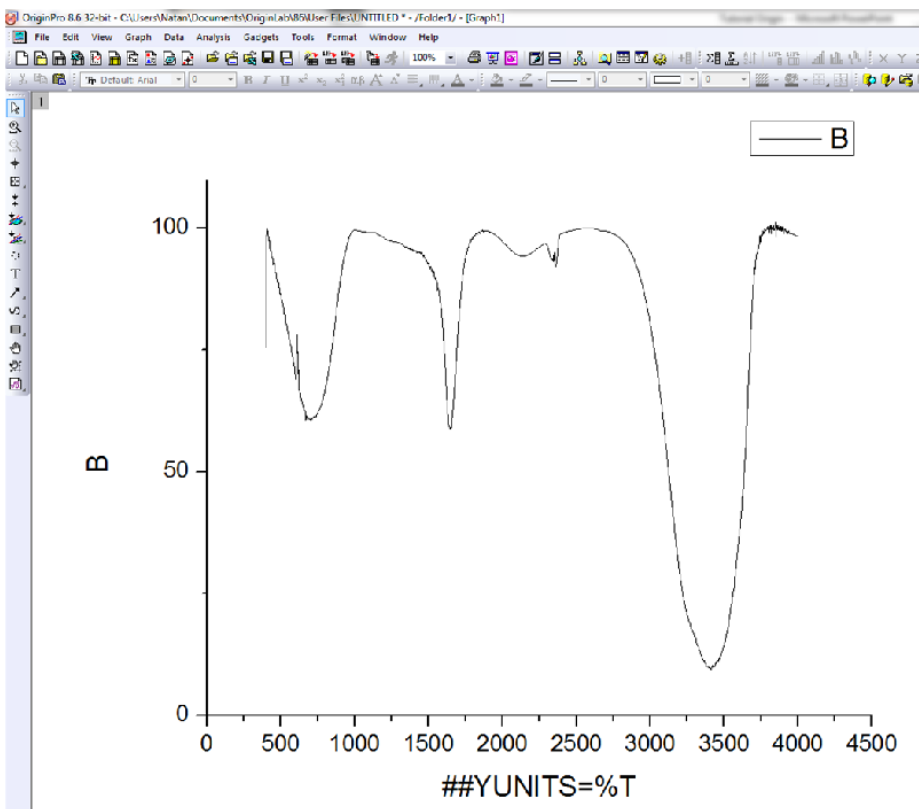
Valor no qual seu espectro começa. Se a transmitância é de 0 a 100%, então o espectro começa em 0.



Incrementos de % de transmissão. Colocar para 10 (de 10 em 10)

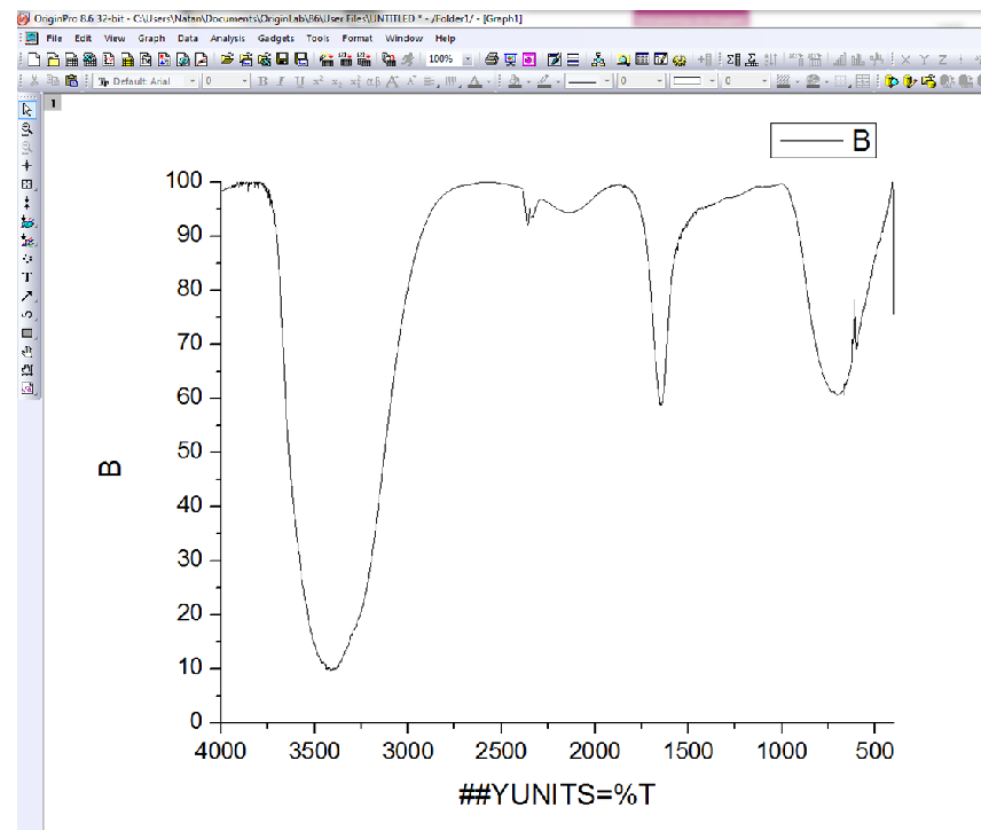
Valor no qual seu espectro termina. Se a transmitância é de 0 a 100%, então o espectro termina em 100.

Após as modificações, clique em **Apply**



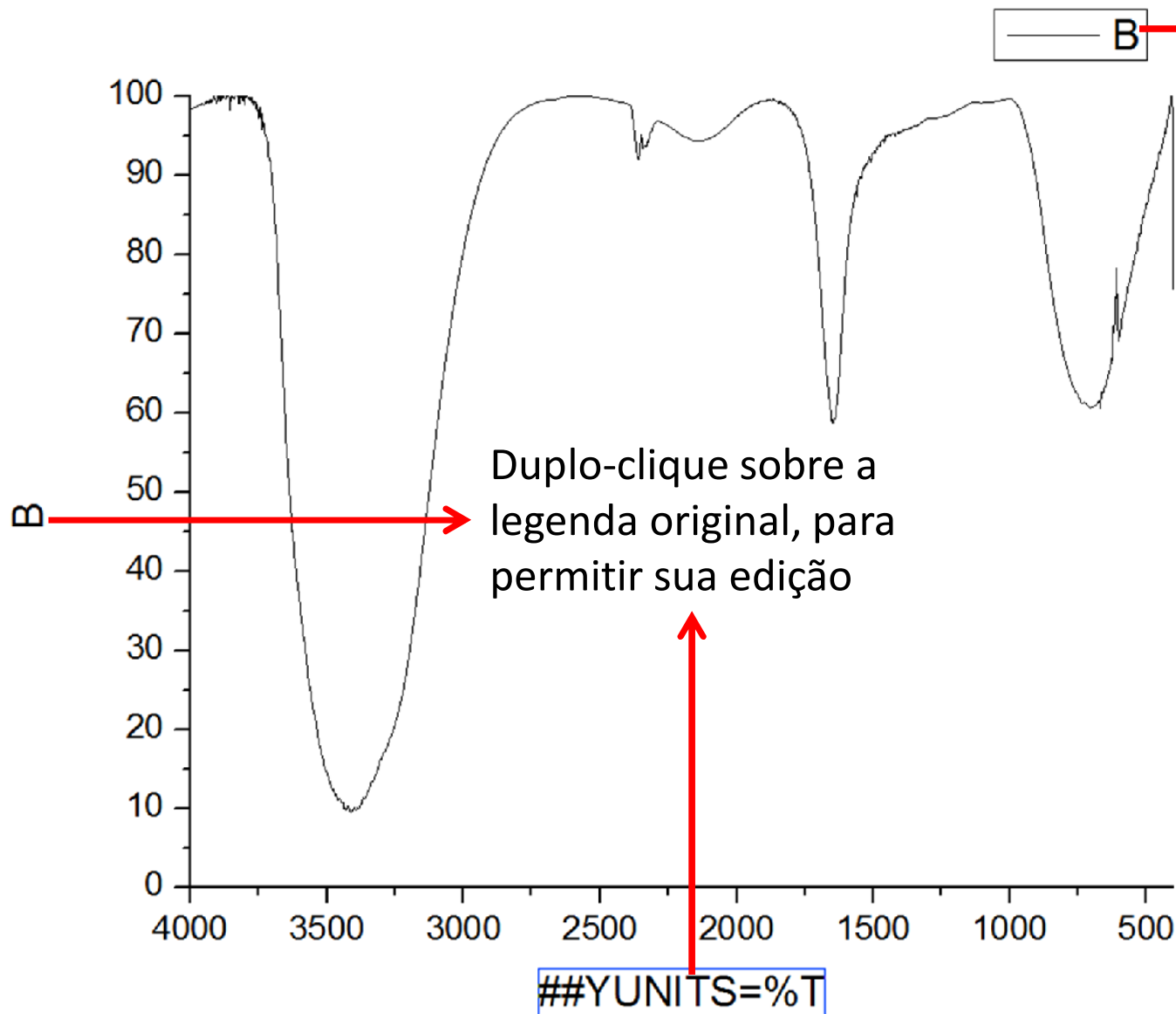
Antes

Depois



➤ Para colocar legendas

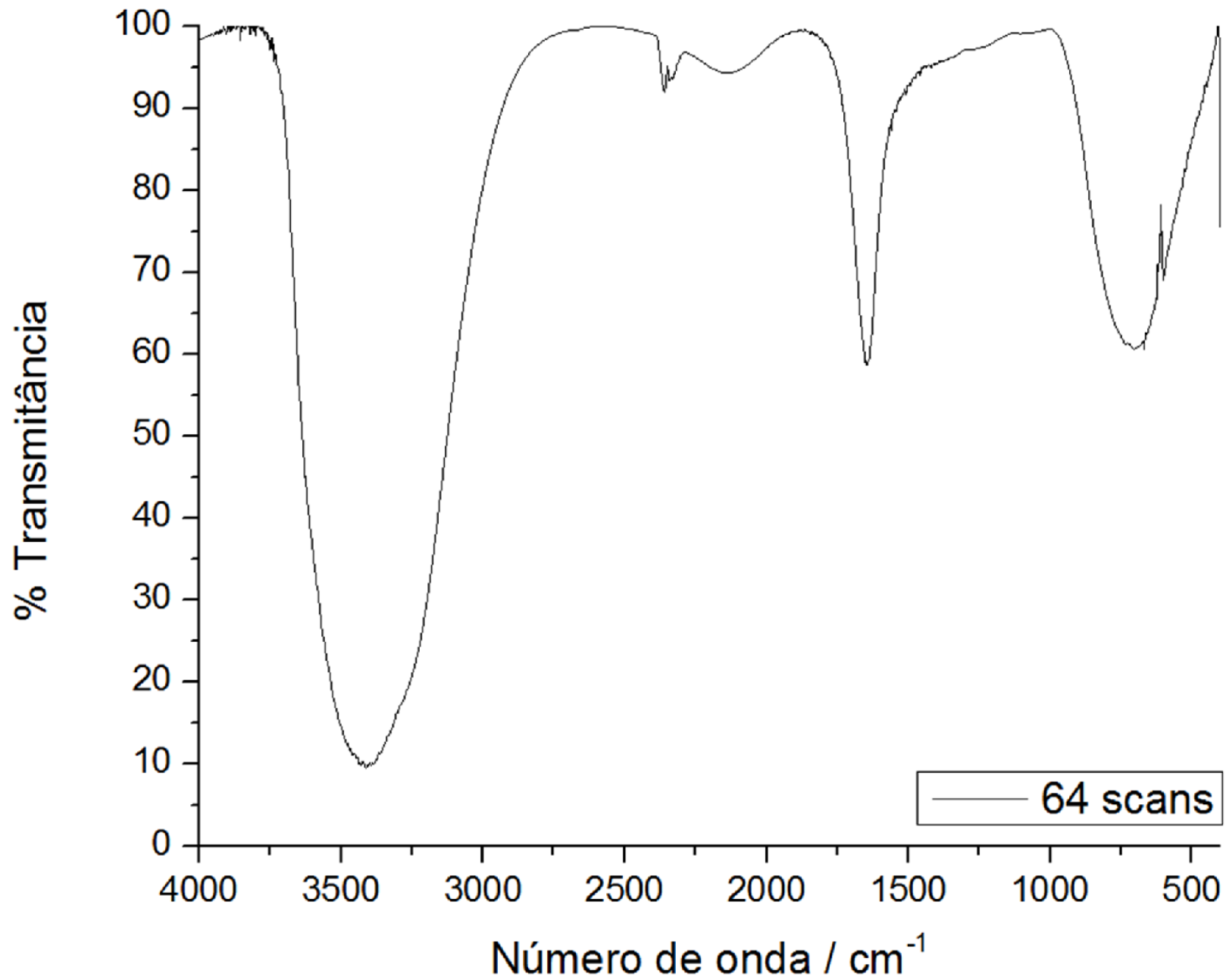
Para colocar um título em seu gráfico, clique com o botão direito na área branca sobre o gráfico e clique na opção **Add Text**



Esta caixa de texto é útil para se colocar legendas, caso mais de um gráfico esteja representado, ou então para descrever as condições nas quais o espectro foi obtido. Para editá-la, basta um duplo-clique sobre a legenda original

➤ Aspecto final

### Espectro FTIR Ácido Benzoico, 0,1 mol.L<sup>-1</sup>



Absorbância



OriginPro 8.6 32-bit - C:\Users\Natan\Documents\OriginLab\86\User Files\UNTITLED \* - /Folder1/

File Edit View Plot Column Worksheet Analysis Statistics Image Tools Format Window Help

100% 0,5 0

Acbenzoico01 - Ac benzoico 01.txt

	A(X)	B(Y)
Long Name	##YUNITS=%T	
Units		
Comments		
Sparklines		
1	3,99265E8	7,65963E8
2	4,01194E8	7,55834E8
3	4,03123E8	9,83264E8
4	4,05051E8	9,90314E8
5	4,0698E8	9,97318E8
6	4,08909E8	1,0007E8
7	4,10838E8	9,933E8
8	4,12767E8	9,89169E8
9	4,14695E8	9,83716E8
10	4,16624E8	9,81688E8

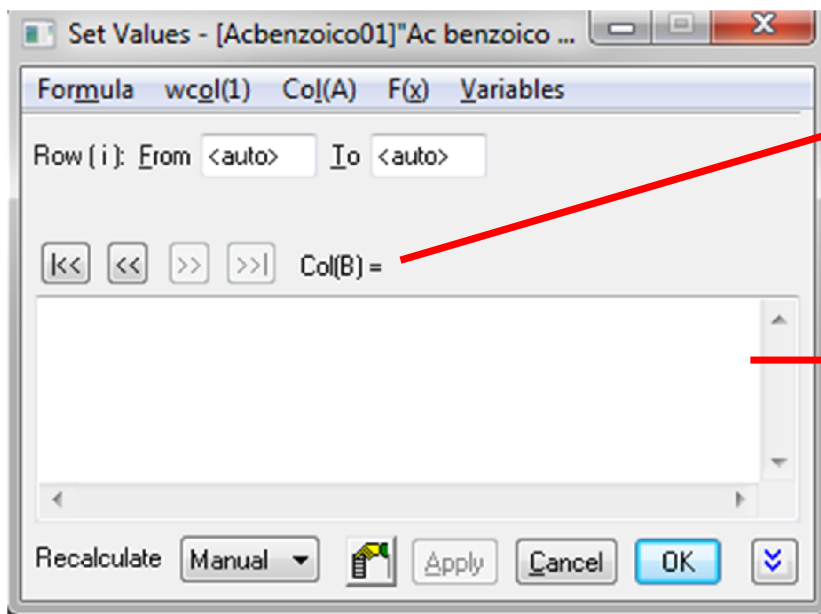
Plot

- Cut Ctrl+X
- Copy Ctrl+C
- Copy (full precision) Ctrl+Alt+C
- Copy (including label rows)
- Paste Ctrl+V
- Insert
- Delete
- Clear Delete
- Remove Link
- Set As
- Set Column Values... Ctrl+Q**
- Fill Column with
- Sort Column
- Sort Worksheet
- Normalize...
- Frequency Count...
- Statistics on Columns...
- Column Width...
- Hide/Unhide Columns
- Set Sampling Interval...
- Mask Cells by Condition...
- Move Columns
- Reverse Order
- Show X Column...
- Slide Show of Dependent Graphs
- Swap Columns...
- Add Sparklines...
- Go To...
- Mask
- Set as Categorical
- Properties...

Clicar com o botão direito do mouse na coluna B(Y)

Clicar em **Set Column Values**

Algumas vezes pode-se querer representar o espectro de absorbância ao invés do espectro de transmitância;



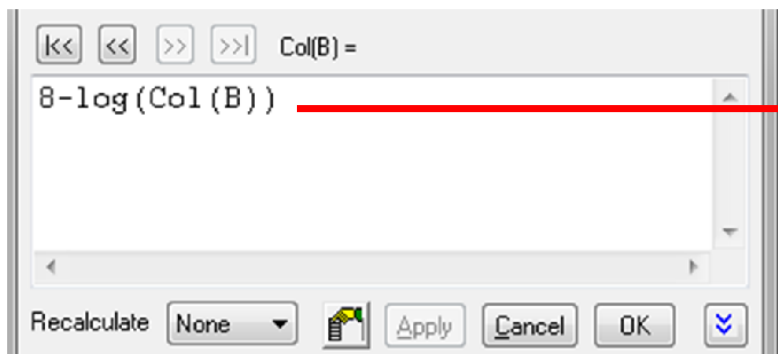
Ao se realizar uma operação nos valores dessa coluna, todos os valores ali presentes sofrerão uma transformação, de acordo com a função estabelecida

Local onde se insere a função desejada

Lembrando que:

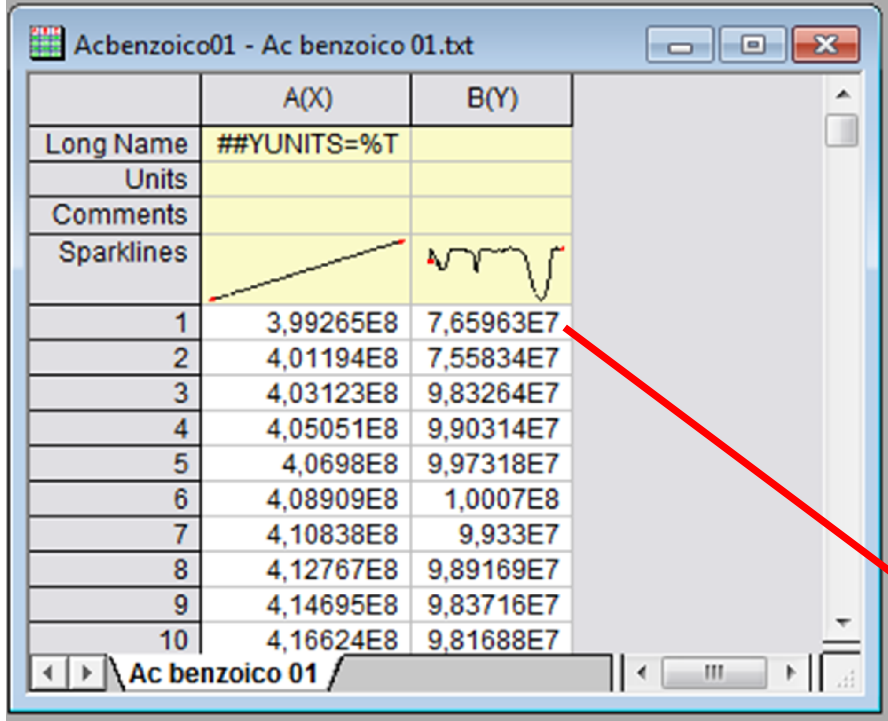
$$A = -\log(\%T) = -\log \frac{T}{100} = -\log \frac{1}{100} - \log T = 2 - \log T$$

- Tem-se que é necessário calcular 2 menos o logaritmo dos valores apresentados na coluna B. Contudo, conforme o fator de  $10^6$  da mudança do .  $\rightarrow$ , , subtrai-se  $\log T$  de 8 (que é  $[2 - \log(1/10^6)]$ ).
- ✓ Vale a pena lembrar que esse valor de 8 é específico para o presente caso. É necessário observar quais valores estão representados inicialmente na Coluna B, antes de realizar qualquer transformação.

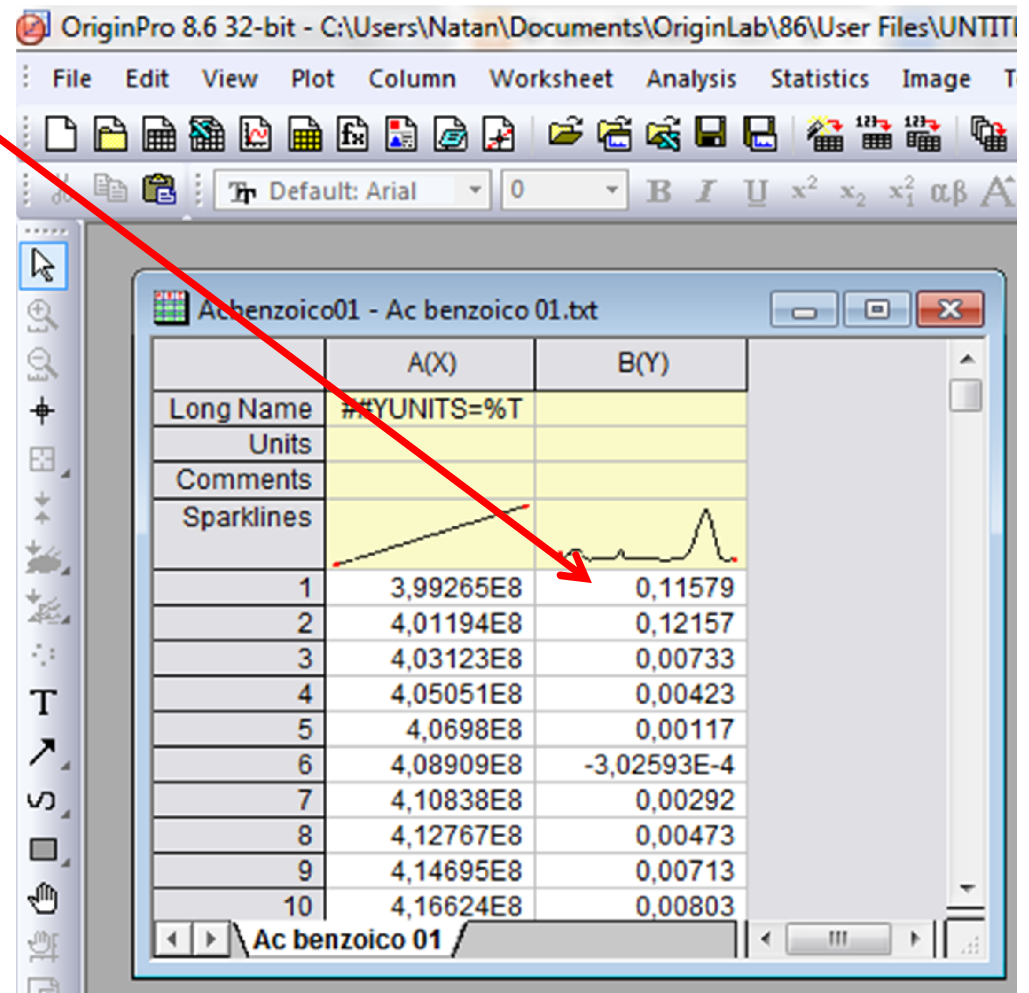


Função que se deve inserir

Clicar em **Apply**



Observar a variação nos valores





Acbenzoico01 - Ac benzoico 01.txt

	A(X)	B(Y)
Long Name	##YUNITS=%T	
Units		
Comments		
Sparklines		
1	3,99265E8	0,115
2	4,01194E8	0,12
3	4,03123E8	0,007
4	4,05051E8	0,004
5	4,0698E8	0,007
6	4,08909E8	#####
7	4,10838E8	0,002
8	4,12767E8	0,004
9	4,14695E8	0,007
10	4,16624E8	0,008

Ac benzoico 01

## Plot

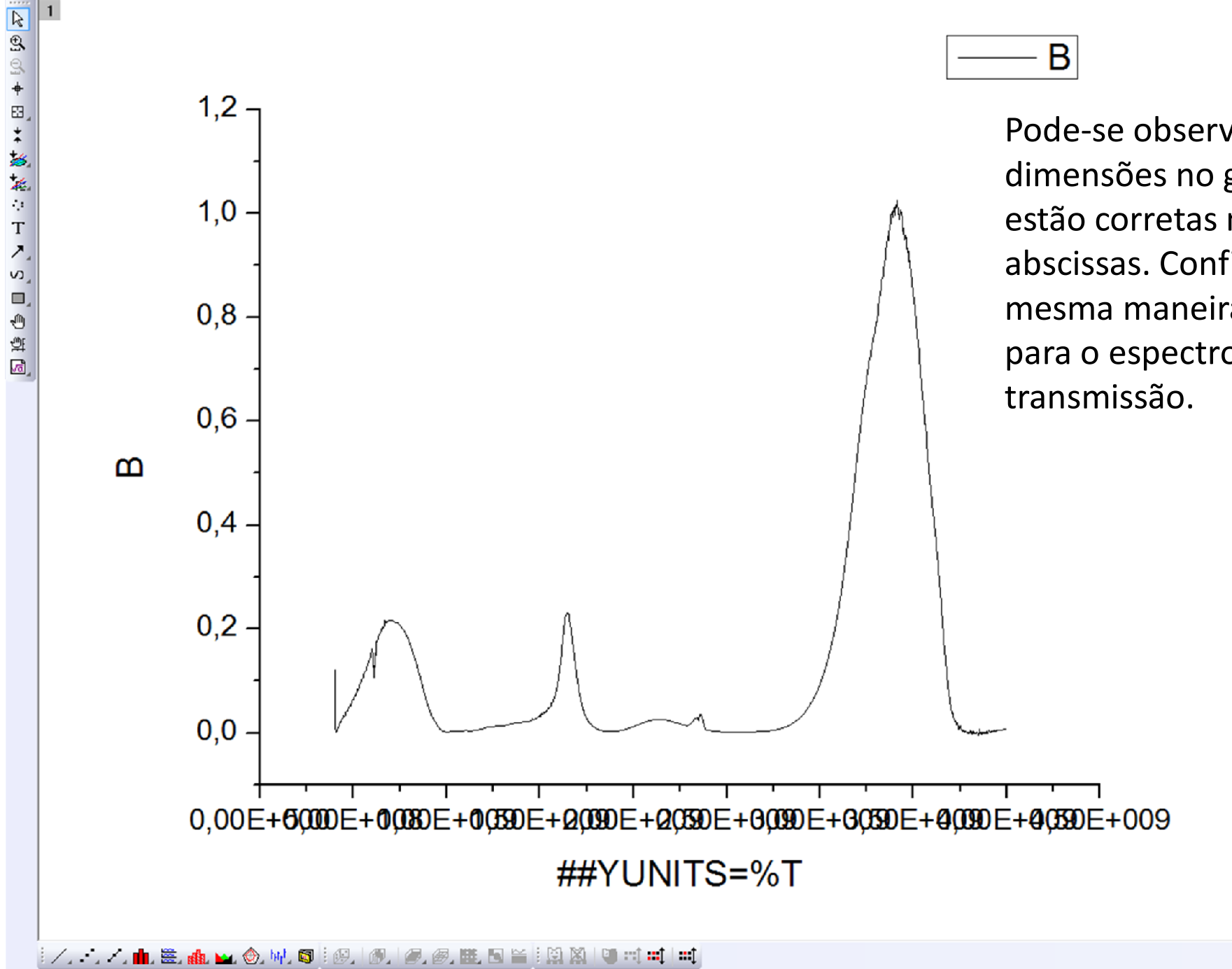
- Cut Ctrl+X
- Copy Ctrl+C
- Copy (full precision) Ctrl+Alt+C
- Copy (including label rows)
- Paste Ctrl+V
- Insert
- Delete
- Clear Delete
- Remove Link
- Set As
- Fill Columns With
- Sort Columns
- Sort Worksheet
- Normalize...
- Statistics on Columns...
- Statistics on Rows...
- Column Width...
- Hide/Unhide Columns
- Set Sampling Interval...
- Mask Cells by Condition...
- Move Columns
- Reverse Order

## Line

- Symbol
- Line + Symbol
- Column/Bar/Pie
- Multi-Curve
- 3D XYY
- 3D XYZ
- 3D Surface
- 3D Wire/Bar/Symbol
- Statistics
- Area
- Contour
- Specialized
- Stock
- Template Library...
- 1 Line
- 2 Scatter

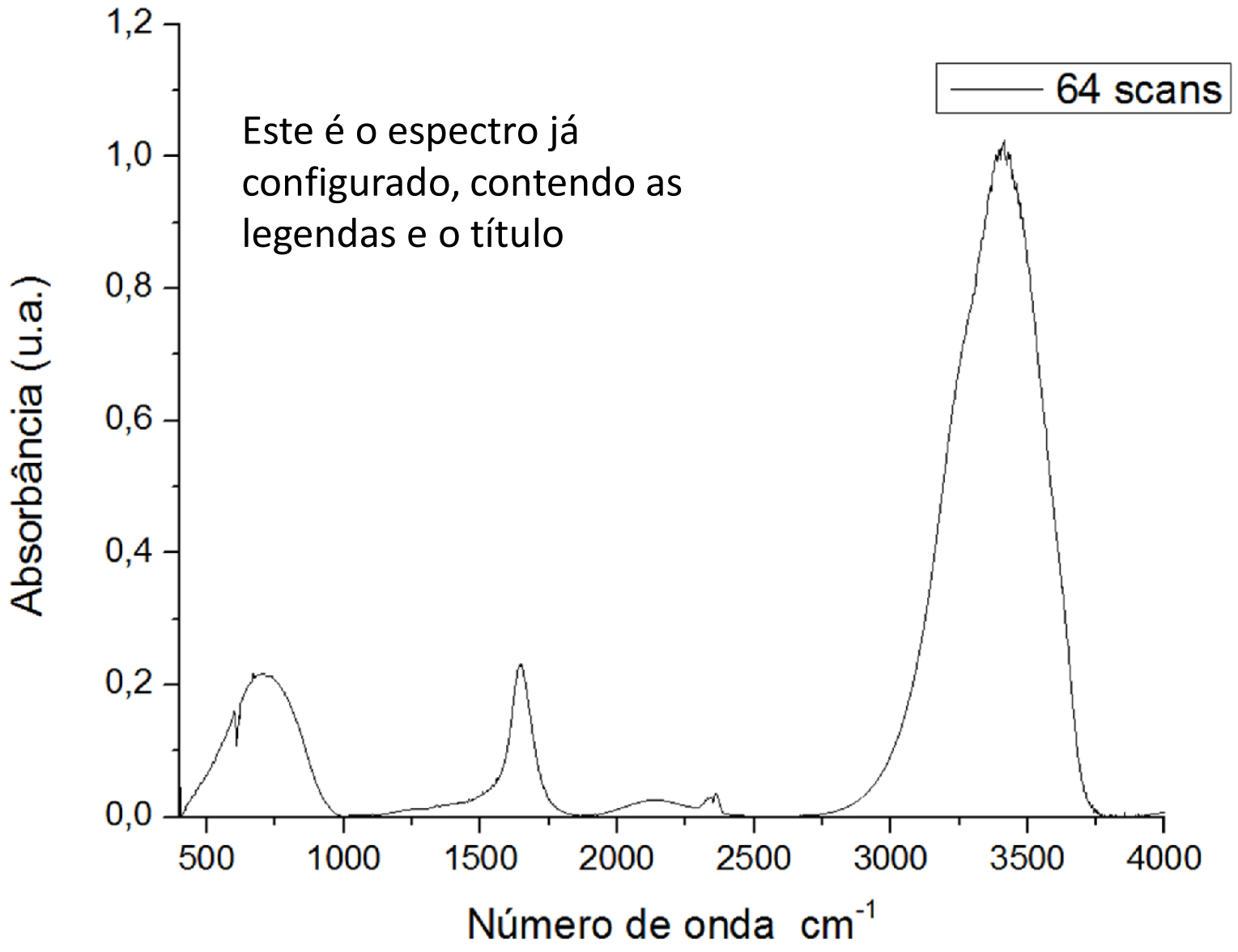
## Line

- Horizontal Step
- Vertical Step
- Spline Connected



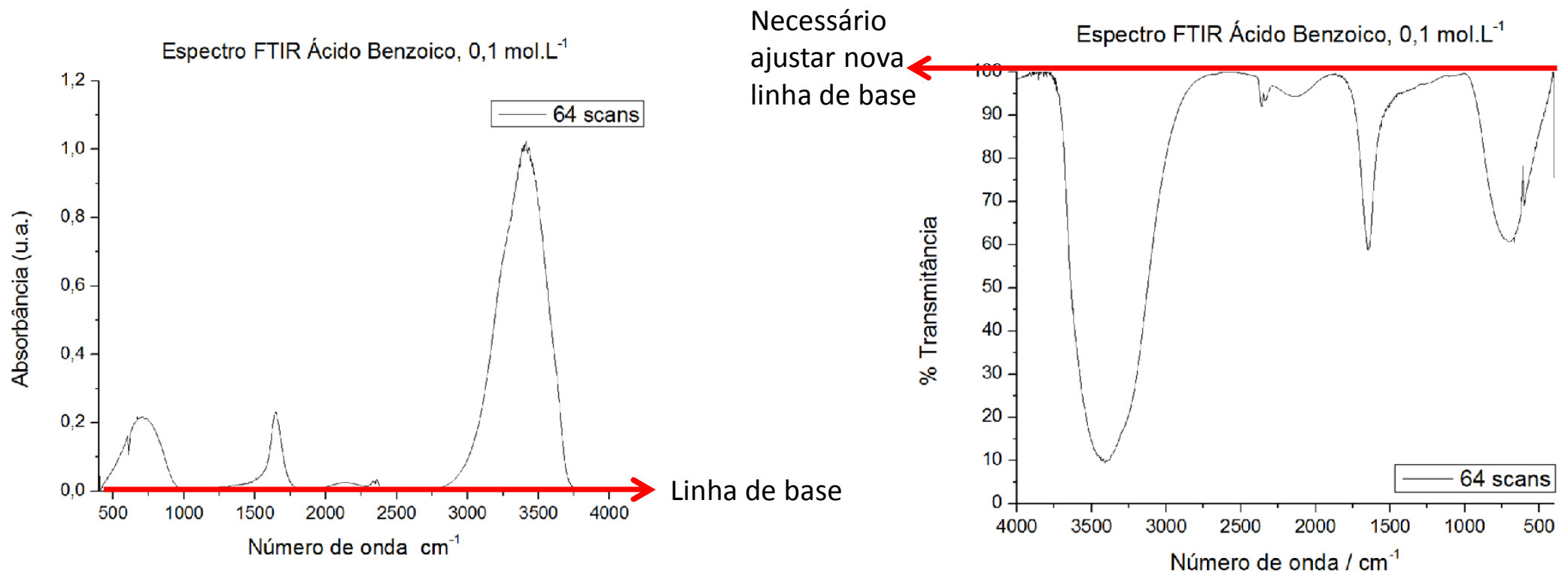


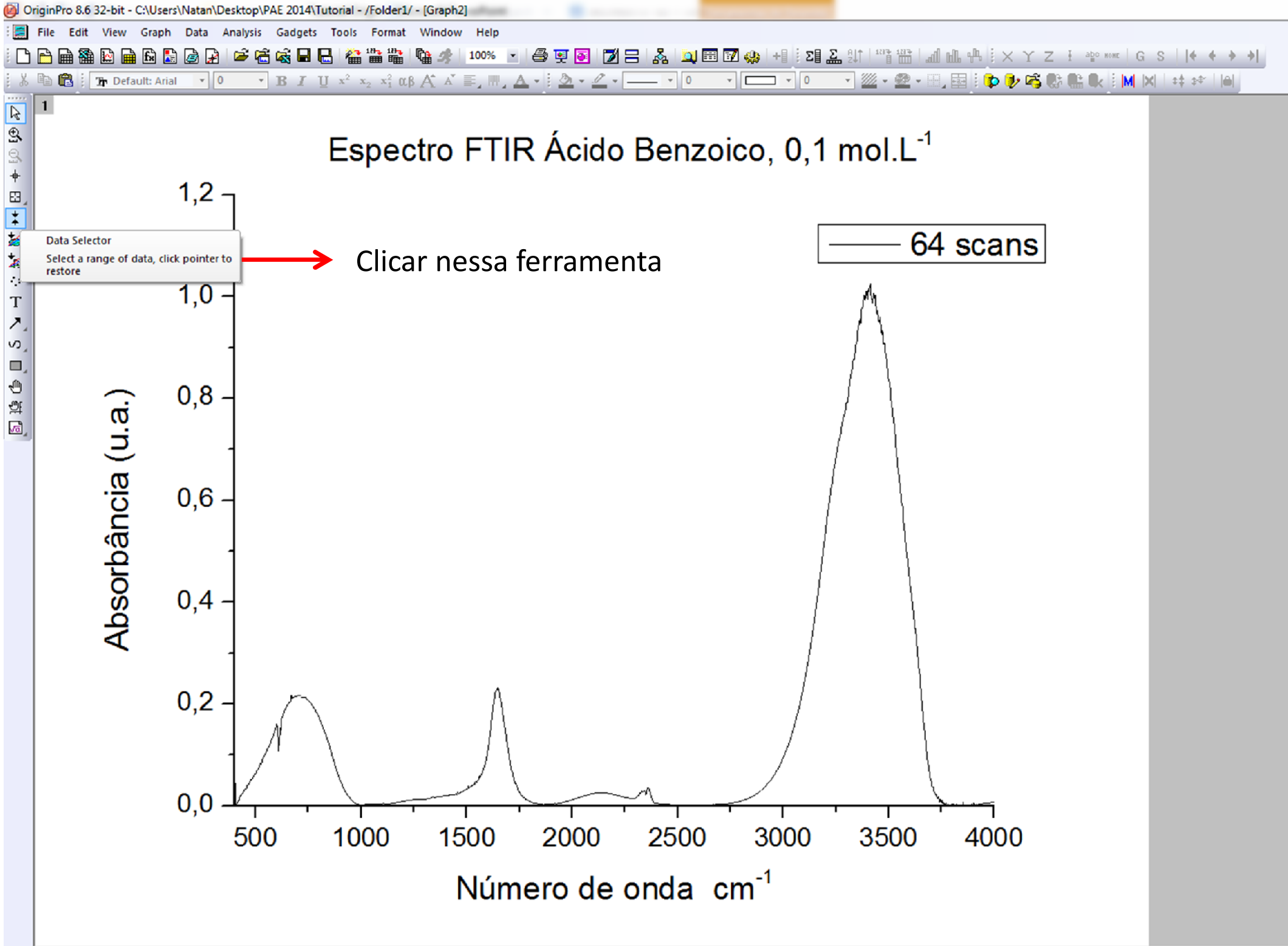
# Espectro FTIR Ácido Benzoico, 0,1 mol.L<sup>-1</sup>

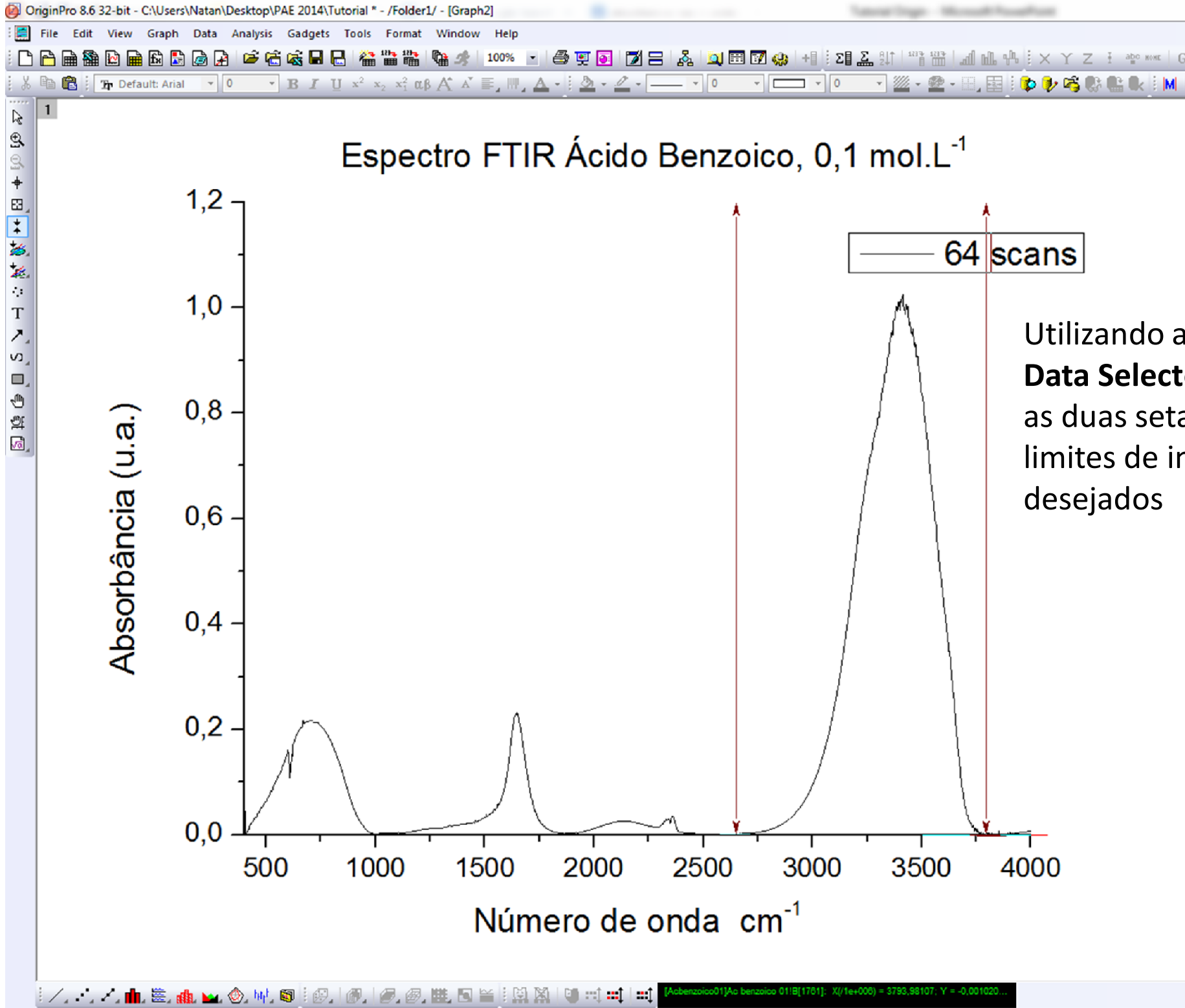


# Integração de picos

- Conhecer a área de um pico / banda é muito interessante em espectroscopia, uma vez que este valor está correlacionado, na maioria das vezes, com a concentração da espécie de interesse.
- A integração de picos em um espectro é mais simples quando a linha de base está próxima ao valor 0. Desse modo, nota-se que os espectros de absorbância FTIR tornam-se mais interessantes que os de transmitância, uma vez que não é necessário reajustar a linha de base (isso não é verdade para todos os casos!)







# Espectro FTIR Ácido Benzoico, 0,1 mol.L<sup>-1</sup>

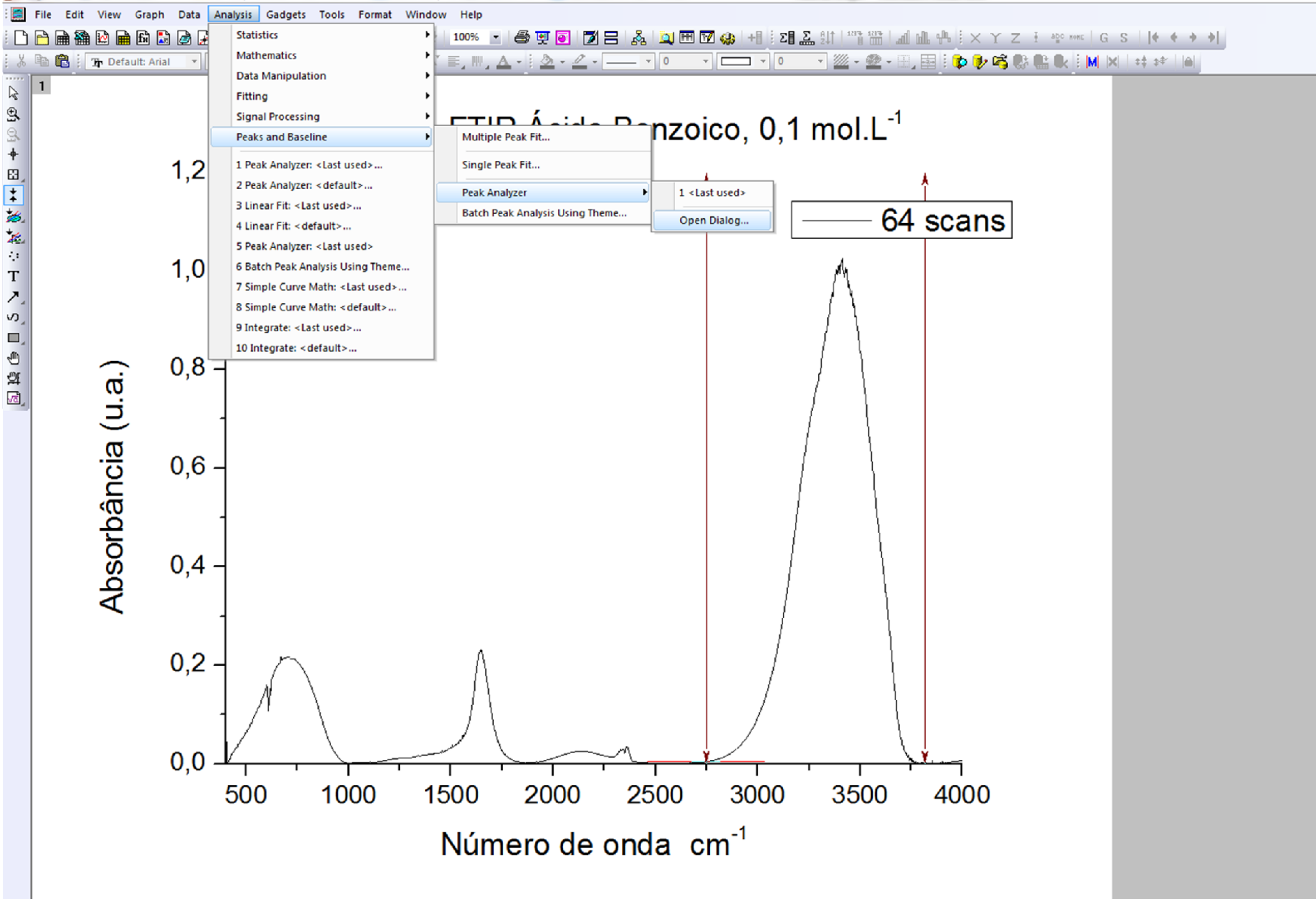
Absorbância (u.a.)

64 scans

Utilizando a ferramenta **Data Selector**, arrastar as duas setas para os limites de integração desejados

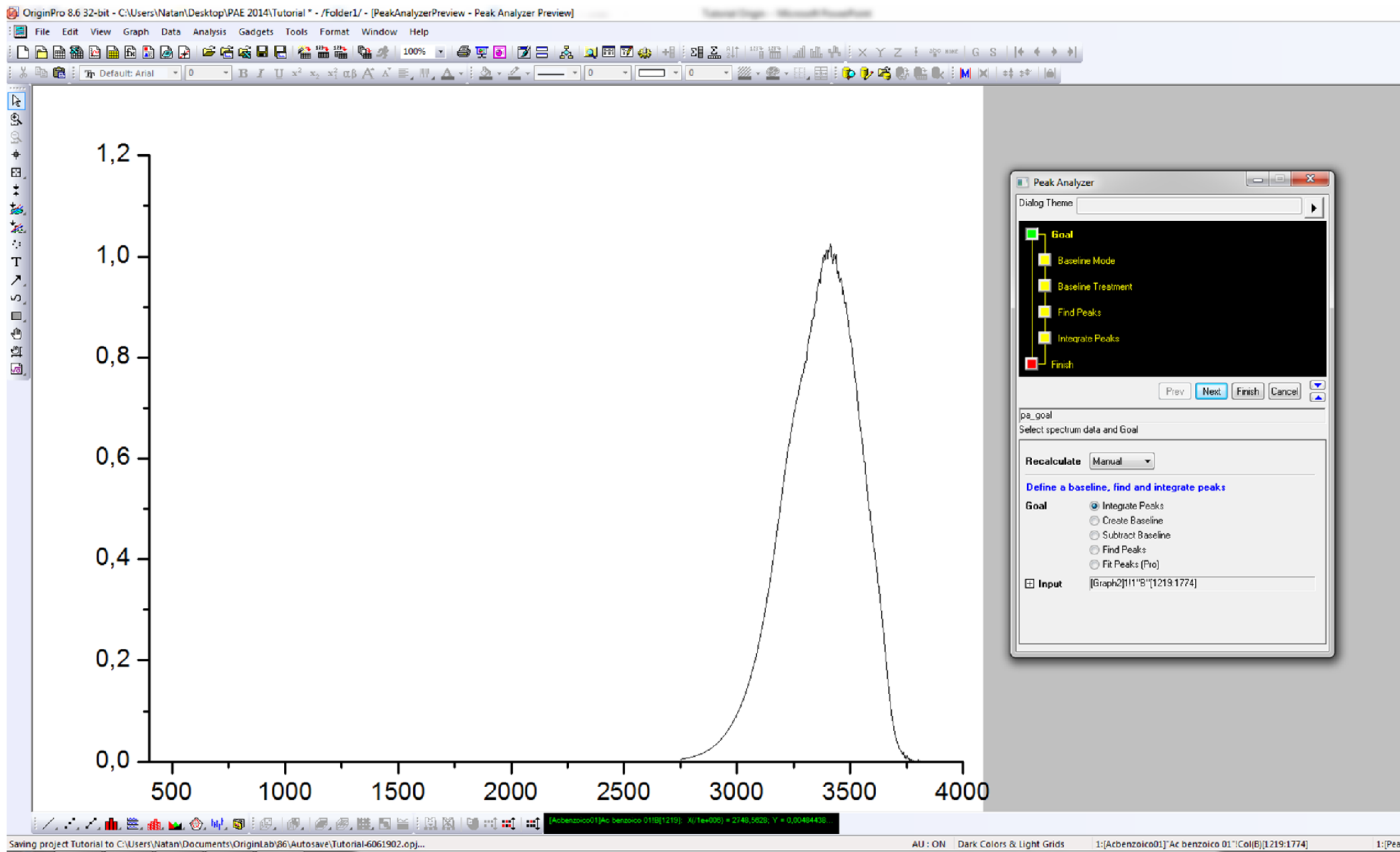
Número de onda cm<sup>-1</sup>

[Acbenzoico01]Ac benzoico 01[B(1701): X/(1e+006) = 3793,98107, Y = -0,001020...

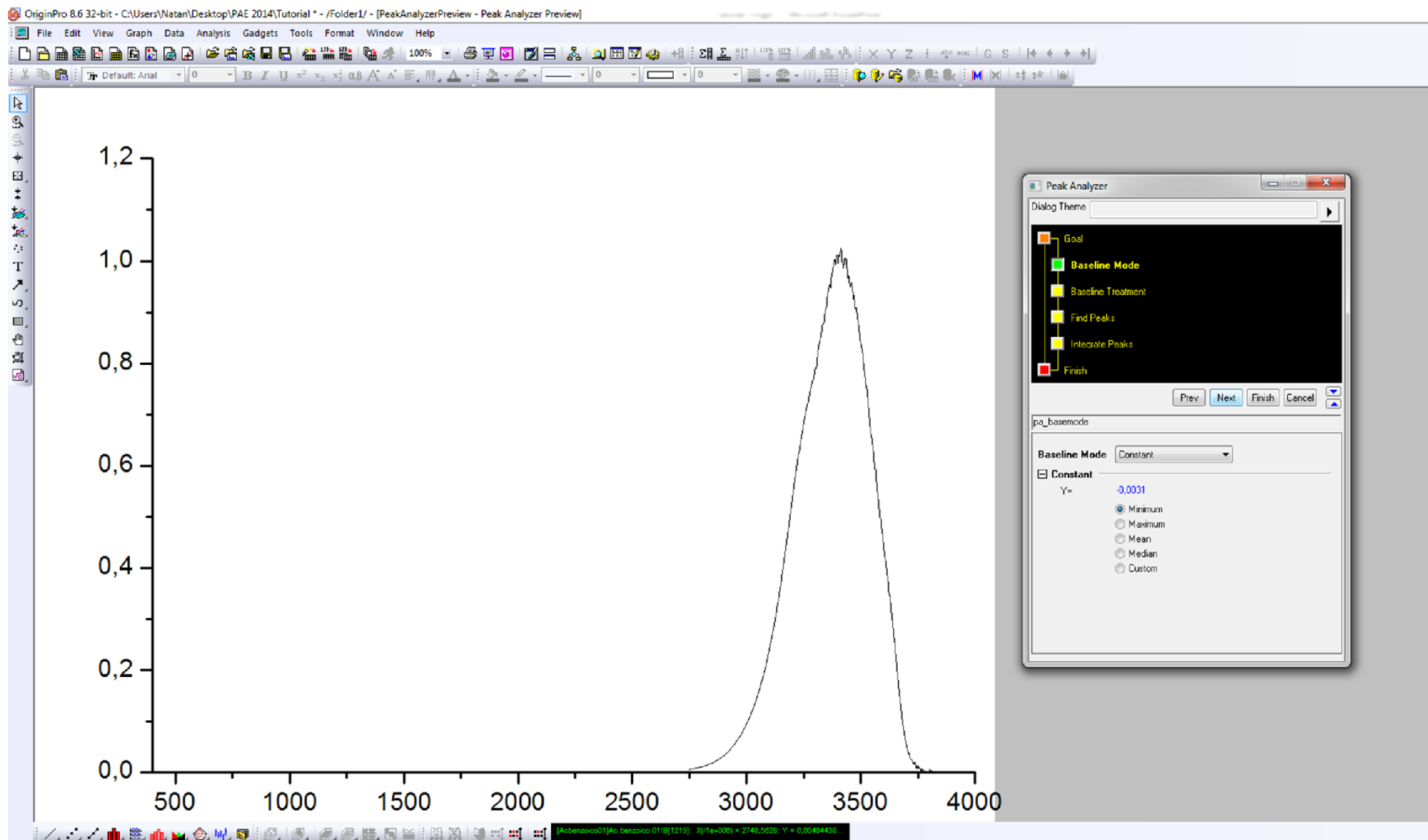




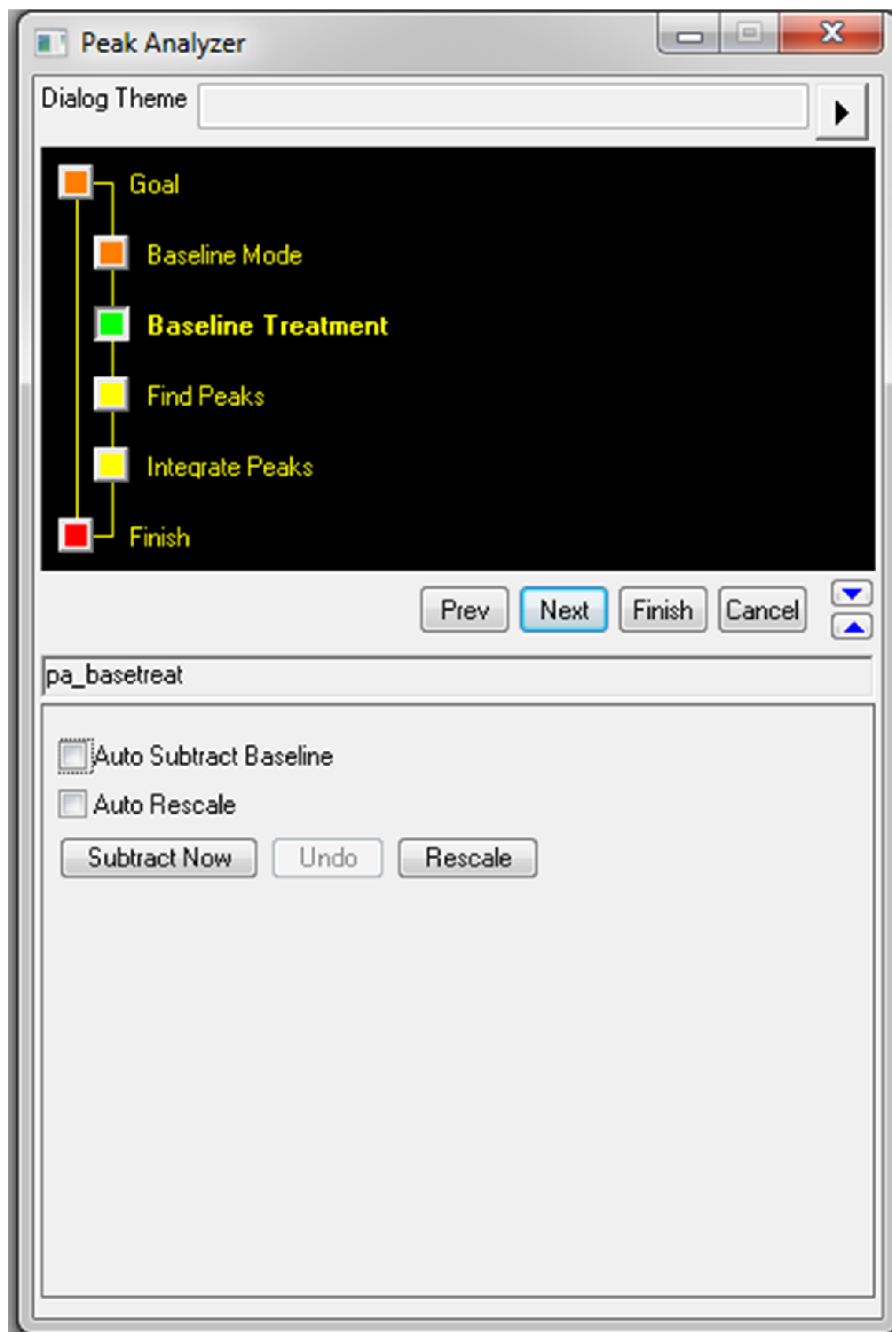
- Como a integração do pico é a desejada, e como já se observa apenas o pico selecionado pelos limites de integração definidos anteriormente, basta clicar em **Next**

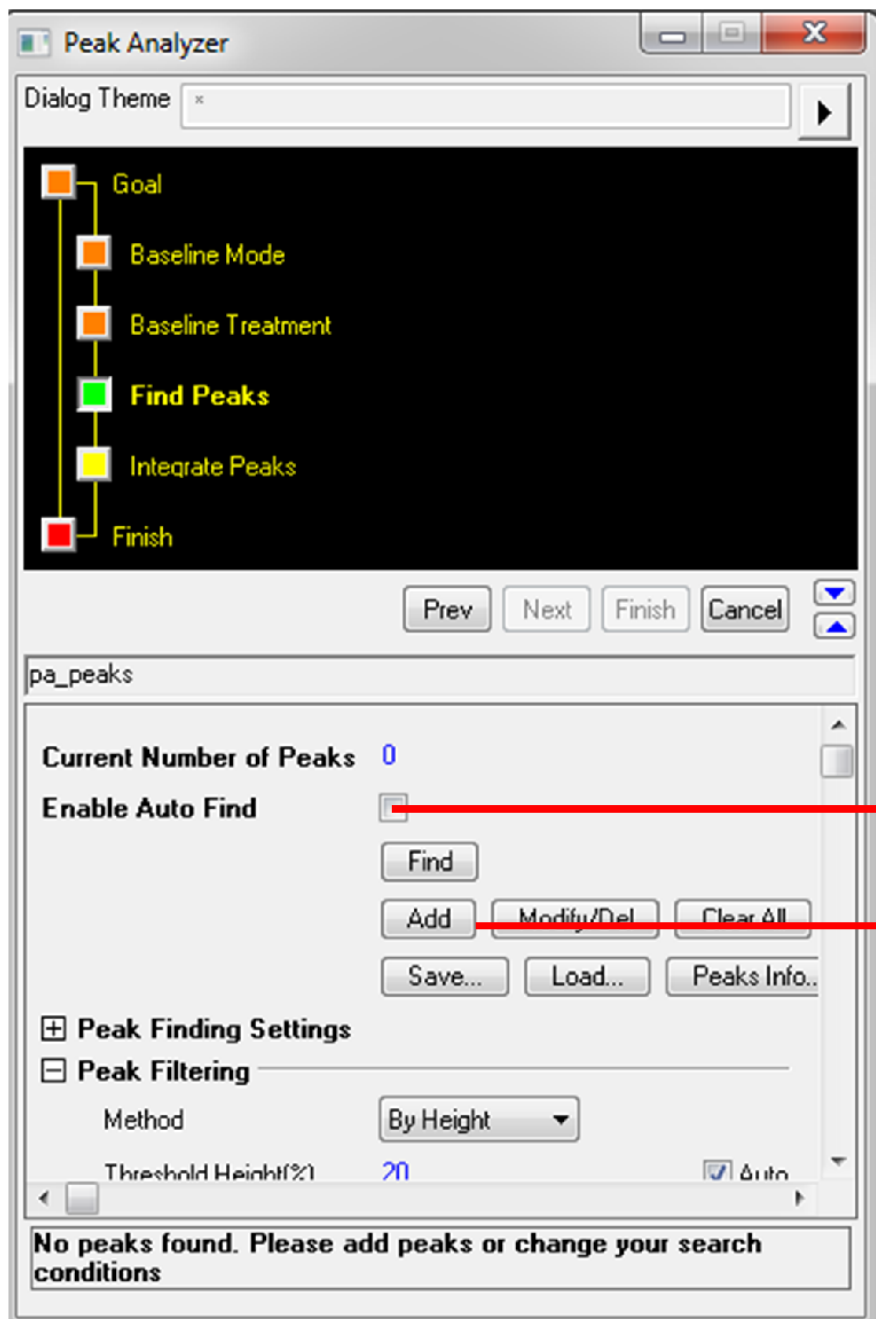


➤ O baseline é o mesmo do espectro original, basta clicar em **Next**



➤ Clicar em **Next**

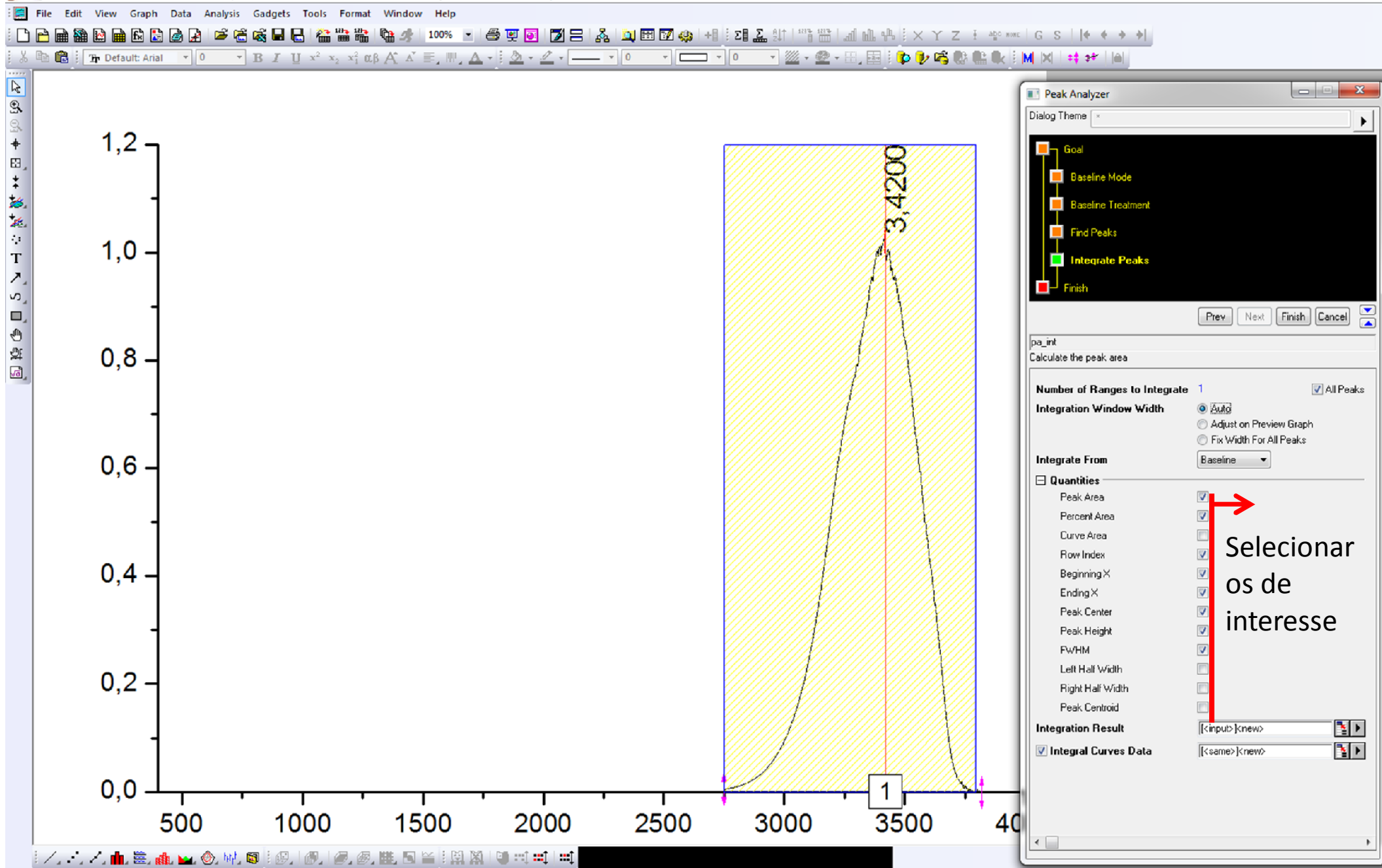




Desabilitar essa opção

Clique em **Add**, e selecione o centro do pico definido anteriormente.  
Feito isso, dê um **enter**

➤ Clicar em **Next**

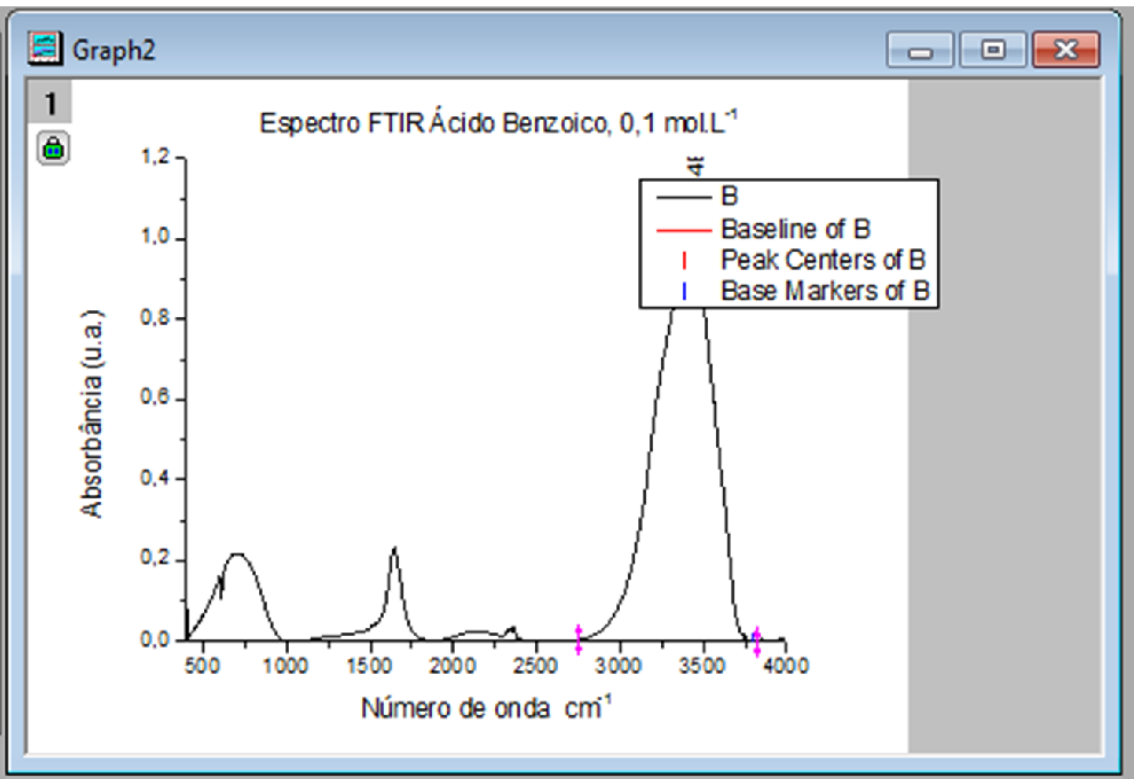


➤ Clicar em **Finish**

Acbenzoico01 - Ac benzoico 01.txt

Comments	Index(X)	P0(Y)	f
Long Name	Index	Area	Area
	1	4,08765E8	
	2		
	3		
	4		
	5		
	6		
	7		
	8		
	9		
	10		
	11		
	12		

Integration\_Result1 Integrated\_Curve

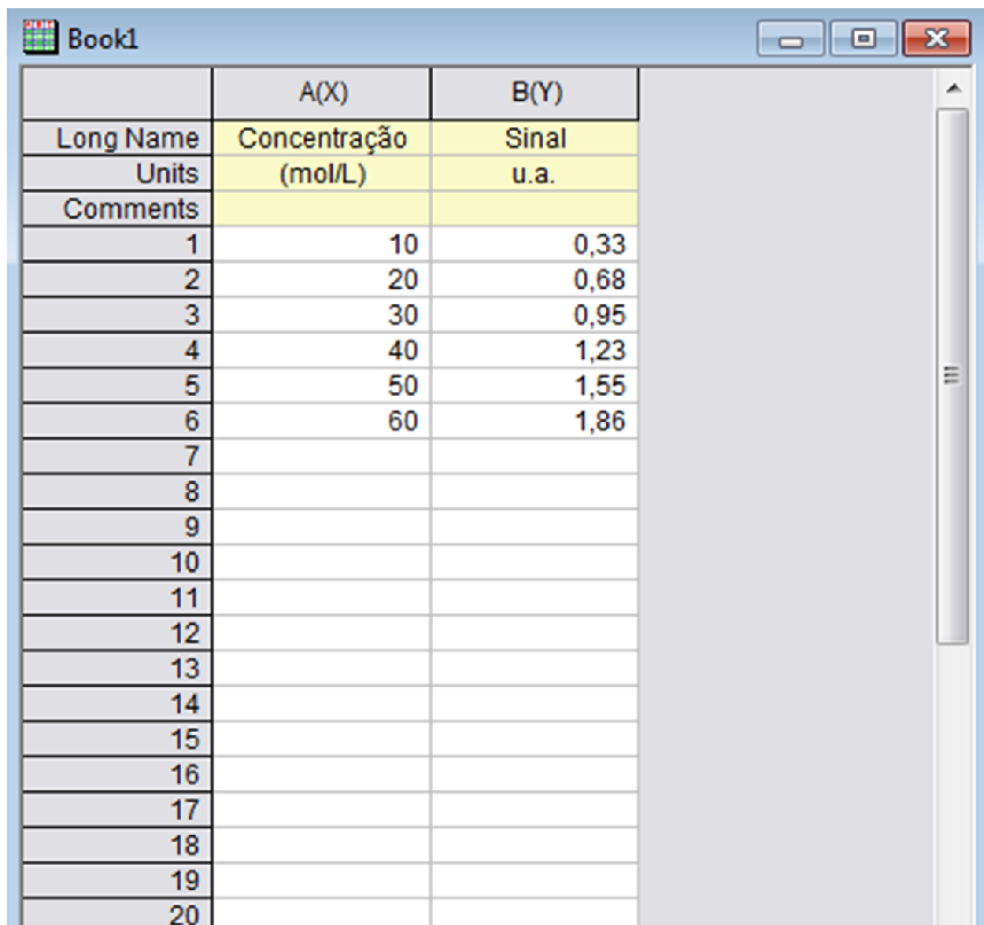


Resultado da integral



# Ajustes Lineares

- Conhecendo-se a relação entre a altura de determinado pico (ou sua área) e a concentração do analito em uma série de medidas, é possível construir-se uma curva analítica (também chamada de curva de calibração).
- Conhecendo o coeficiente angular e o coeficiente linear dessas curvas, é possível determinar a concentração de uma solução desconhecida!



	A(X)	B(Y)
Long Name	Concentração	Sinal
Units	(mol/L)	u.a.
Comments		
1	10	0,33
2	20	0,68
3	30	0,95
4	40	1,23
5	50	1,55
6	60	1,86
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		
20		



	A(X)	B
Long Name	Concentração	Si
Units	(mol/L)	u
Comments		
1	10	
2	20	
3	30	
4	40	
5	50	
6	60	
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		
20		
21		

Book1

Plot

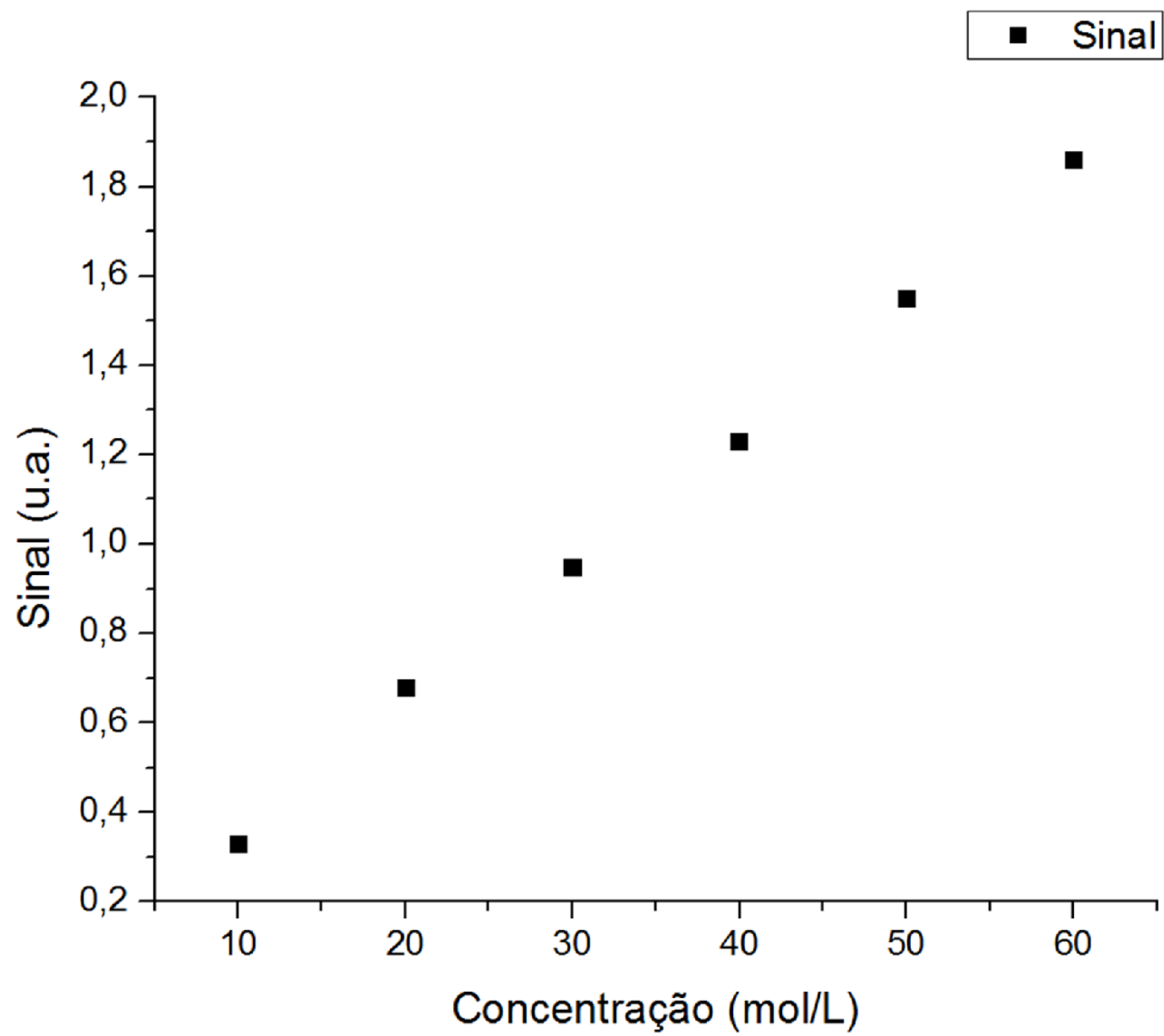
- Cut Ctrl+X
- Copy Ctrl+C
- Copy (full precision) Ctrl+Alt+C
- Copy (including label rows)
- Paste Ctrl+V
- Insert
- Delete
- Clear Delete
- Remove Link
- Set As
- Fill Columns With
- Sort Columns
- Sort Worksheet
- Normalize...
- Statistics on Columns...
- Statistics on Rows...
- Column Width...
- Hide/Unhide Columns
- Set Sampling Interval...
- Mask Cells by Condition...
- Move Columns
- Reverse Order
- Show X Column...
- Slide Show of Dependent Graphs
- Swap Columns...
- Add Sparklines...
- Go To...
- Mask
- Set as Categorical
- Properties...
- Set Style

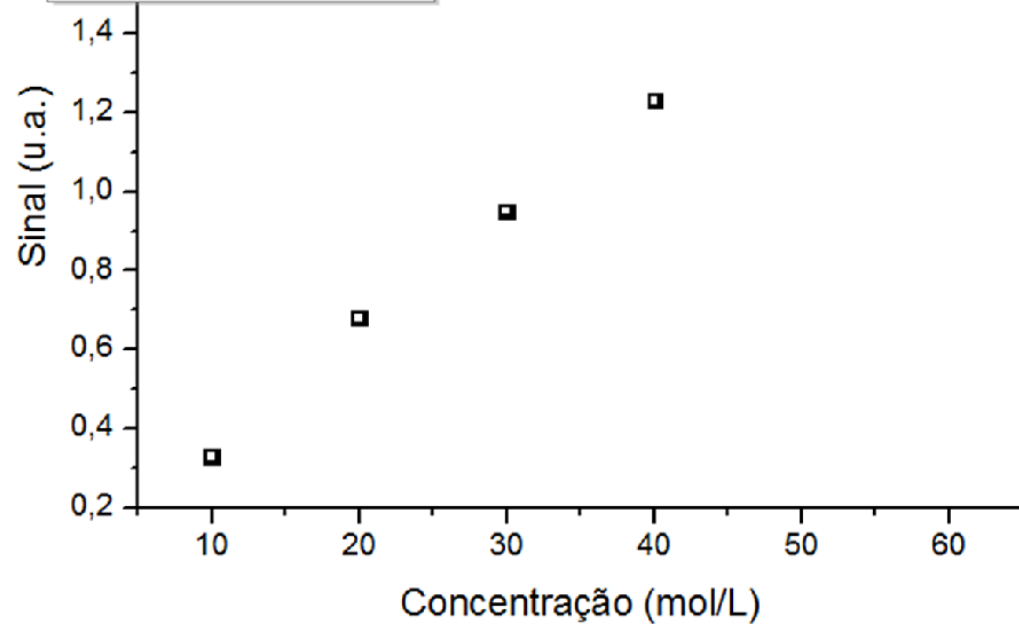
Line

- Symbol
- Line + Symbol
- Column/Bar/Pie
- Multi-Curve
- 3D XY
- 3D XYZ
- 3D Surface
- 3D Wire/Bar/Symbol
- Statistics
- Area
- Contour
- Specialized
- Stock
- Template Library...
- 1 Scatter
- 2 Line

Scatter

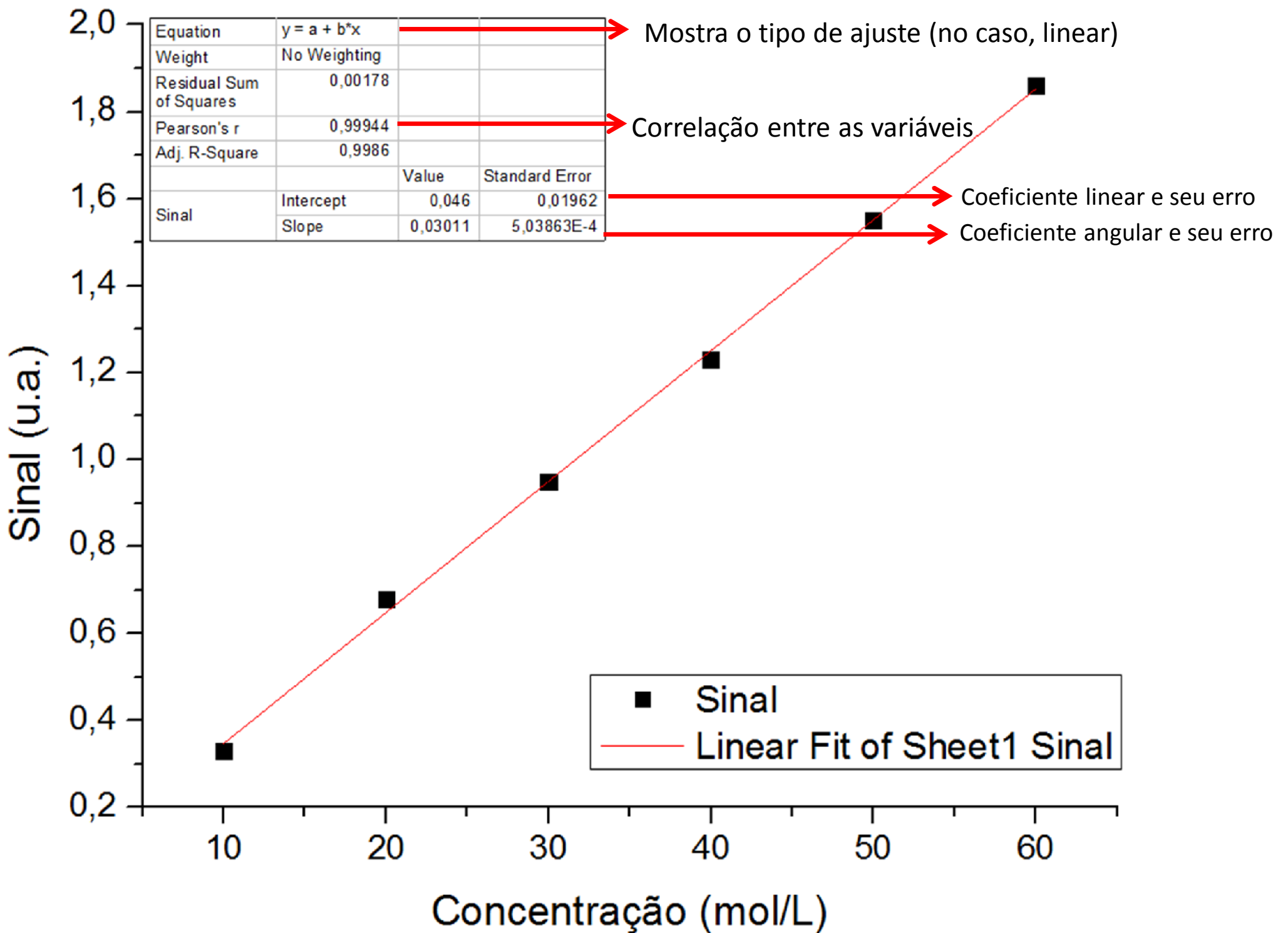
- Scatter Central
- Y Error
- XY Error
- Vertical Drop Line
- Bubble
- Color Mapped
- Bubble + Color Mapped











- Assim, se uma amostra de concentração desconhecida apresentar um sinal de 1,47, é possível estimar sua concentração a partir dos valores de coeficiente angular e linear:

$$\text{Sinal} = a + b \cdot [X]$$

$$\text{Sinal} - a = b \cdot [X]$$

$$[X] = \frac{\text{Sinal} - a}{b}$$

- Para o caso do exemplo:

$$[X] = \frac{1,47 - 0,046}{0,03011}$$

$$[X] = 47,29 \text{ mol/L}$$