



Safety News No. 2

Vážení přátelé a zákazníci, dostáváte do rukou druhé číslo e-mailového občasníku **Safety News**, který je zaměřen na detekční techniky pro chemickou analýzu využívané v bezpečnostní oblasti (armádní a policejní aplikace) a v oblasti operativní analýzy nebezpečných látek (HAZMAT aplikace, rychlá identifikace odpadů a další).

Dnešní číslo je zaměřeno na tzv. **HAZMAT** aplikace – je určeno zejména pro chemické jednotky integrovaného záchranného systému, pro chemické jednotky velkých chemických závodů a na **bezpečnostní aplikace** (ochrana významných objektů a obyvatelstva) před nebezpečnými chemickými látkami.

V oblasti HAZMAT se jedná o srovnání vhodnosti IR a Ramanovy spektrometrie z hlediska HAZMAT aplikací a informace o nových technologiích - vzdálené monitorování prostorového rozložení kontaminace plynými nebezpečnými látkami pomocí pasivní IR spektrometrie (systém SIGIS od firmy Air Sense) a o mobilní GS-MS spektrometr s iontovou pastí od firmy Griffin, který zvládá i MS/MS analýzu a nabízí tak možnost detekce prakticky neomezeného počtu látek.

V oblasti bezpečnostních technologií se jedná o informace věnované novým multispektrálním IR aktivním detektorům nebezpečných látek ChemSight od firmy Avir Sensors, které se vyznačují velmi vysokou spolehlivostí a zcela bezúdržbovým provozem (nyní nově nasazeny například k ochraně metra ve Washingtonu a nově instalovány v londýnském metru) a o stacionární MS/MS spektrometry od firmy Griffin.

Novinky pro HAZMAT

V současné době na jedné straně významně vzrůstají požadavky na tzv. "First Responders", tedy týmy zodpovědné za prvotní zásahy v případě průmyslových havárií nebo teroristických útoků a na druhé straně se také významně rozšiřují možnosti detekční techniky, které reagují na nové požadavky. Jedná se zejména o využití tzv. multispektrálních a multidetekčních technologií, které umožňují velmi rychlou detekci širokého spektra látek, a o technologie umožňující bezkontaktní monitorování širokého perimetru pro případ průmyslových havárií.



Pro rychlou analýzu pevných a kapalných látek nabízíme dvě řešení, která byla zmíněna již v minulém čísle. Jedná se zejména o již rozšířený mobilní Ramanův spektrometr **First Defender** ([více zde](#)) a **nový FT IR spektrometr True Defender** ([více zde](#)) od stejného výrobce (AhuraScientific). Základní charakteristiku tohoto unikátního mobilního infračerveného spektrometru s fourierovou transformací (FT IR) jsme přinesli již v minulém čísle. Díky diamantovému ATR a speciálnímu přípravku (pro reprodukovatelné přitlačení vzorku k ATR) spektrometr umožňuje snadné měření kapalin, past, gelů, folií, prášků a pevných vzorků. Spektrometr má unikátní software, který využívá patentovaných chemometrických algoritmů, již dříve použitých u Ramanova spektrometru First

Defender. Spektrometr se vyznačuje vynikající spolehlivostí identifikace látek (minimalizace falešných pozitivních identifikací), ale zejména schopností automaticky identifikovat směsi látek až do pěti komponent!

V tomto čísle bychom se zaměřili na vysvětlení výhod a nevýhod obou technologií (Ramanovy a infračervené spektrometrie) a vhodnosti jejich použití.

Základní princip obou techniky je zřejmý z Obrázku 1.

Infračervená spektrometrie je absorpční/reflektanční technologie, její hlavní nevýhodou jsou problémy se vzorkováním. V případě spektrometrů určených pro identifikaci látek se využívá tzv. techniky ATR. Vzorek je v těsném kontaktu s krystalem a paprsek opakovaně proniká do velmi tenké povrchové vrstvy a je zpět reflektován do krystalu. V tomto uspořádání můžeme měřit i silně absorbující vzorky. Hlavní nevýhodou je, že vzorek musí být v těsném kontaktu s ATR krystalem – v případě pevných vzorků a prášků musí být poměrně vysokou silou přitlačen na plochu krystalu. To znemožňuje měření tlakově citlivých vzorků (například některých výbušnin) a měření vzorků uvnitř uzavřených obalů. Další nevýhodou je intenzivní absorpce vody, FT IR spektrometrie není vhodná pro měření vodných roztoků, na druhé straně můžeme snadno identifikovat přítomnost vody ve vzorku.

Ramanova spektrometrie měří rozptylové spektrum vzniklé po interakci monochromatického excitačního laserového paprsku se vzorkem. Rozptylové spektrum se šíří všemi směry. Výhodou Ramanovy spektrometrie je to, že nemusíme být v přímém kontaktu se vzorkem, můžeme měřit i tlakově citlivé vzorky nebo měřit skrz obaly (pokud propouští excitační a vzniklé Ramanovo záření). Další výhodou je, že Ramanovo spektrum vody je velmi slabé, můžeme tudíž bez problémů identifikovat látky rozpuštěné ve vodě. Ramanova spektrometrie je rušena fluorescencí, není tedy vhodná pro vzorky, které mají silnou vlastní fluorescenci (zpravidla tmavé, silně barevné vzorky).

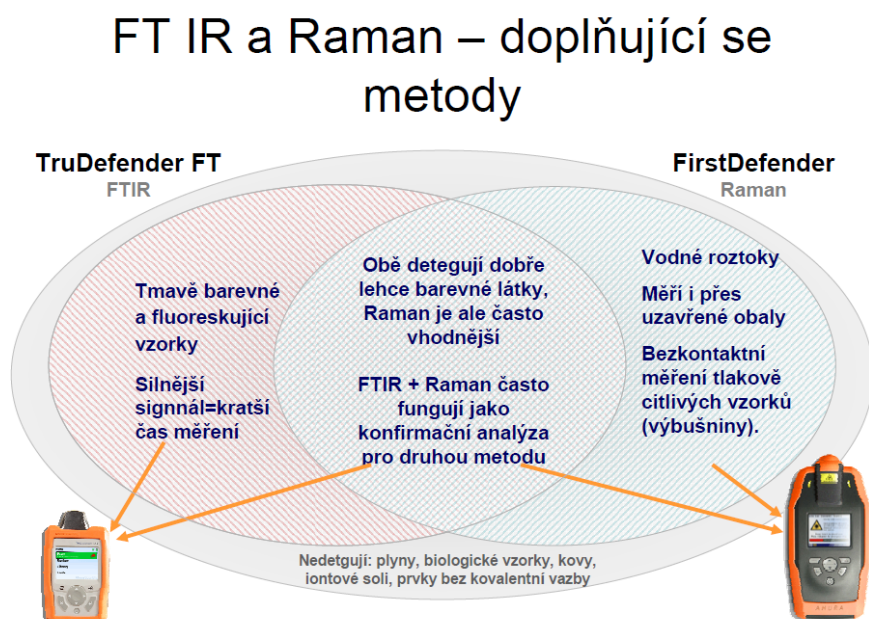
Obě techniky poskytují velmi dobře strukturovaná vibrační spektra. Jsou ideální pro identifikaci látek. Velká část látek má kvalitní infračervené (IR) i Ramanovo spektrum, intenzita jednotlivých pásů se ale liší. Pro některé látky je tak vhodnější pouze jedna technika. IR spektrometrie má intenzivnější signál pro malé polární molekuly (voda, HCl, některé soli) nebo sloučeniny s jednoduchými vazbami C-C, C-H, C-O, alifatické uhlovodíky, cukry/škrob/celulóza. Oproti tomu Ramanova spektrometrie má intenzivní spektra červeného fosforu, síry, polyatomických anorganických sloučenin (dusičnan amonný, kyanidy, ...) a většiny organických látek také poskytuje intenzivnější spektra (benzen, fenoly, ...).

Obr. 1 Základní schéma infračervené a Ramanovy spektrometrie.



Z výše uvedených údajů je patrné, že obě techniky se vzájemně doplňují, což je názorně shrnuto na Obrázku 2. Kompletní srovnání je na Obrázku 3. Z něho je jasné, že pro aplikace u tzv. „First Responders“ nebo obecně v celé problematice HAZMAT je vhodnější technologie Ramanovy spektrometrie, neboť umožňuje bezkontaktní měření, měření skrz obaly a měření vodných roztoků. Infračervená spektrometrie (spektrometr True Defender) je ideální doplňkovou technikou, která umožňuje měření vzorků, které Ramanovou spektrometrií měřit nelze (zejména vzorky s intenzivní fluorescencí). Pro některé vzorky může být čas analýzy u IR spektrometrie významně kratší, v řadě kritických případů může být tato technika použita také jako konfirmační metoda (kontrolní technologie) pro Ramanovu spektrometrii (spektrometr First Defender).

Obr. 2



Obr. 3 Kompletní srovnání FT IR a Raman.

	FTIR	Raman
Jednoduchost vzorkování	Výborná	Výborná
Selektivita	Výborná	Výborná
Citlivost	Výborná	Výborná
Interference	voda, obaly, Plyny atmosféry	Fluorescence
Snadnost interpretace	Výborná	Výborná
	Výborná	Průměrná

Firma Ahura Scientific nyní nabízí i tzv. Combo systém, kdy jsou v jednom transportním obalu umístěny oba spektrometry.



Pro detekci plyných a těkavých nebezpečných látek v oblasti HAZMAT nabízíme analyzátor GDA2 od německé firmy Air Sense. Tento detektor je založen na detektorovém poli – kombinaci pěti detektorů v jednom zařízení, Ion Mobility Spektrometru (IMS), fotoionizačního detektoru (PID), elektrochemické cely a dvou metaloxidových detekčních čidel. *Toto zařízení bylo podrobně popsáno v minulém čísle tohoto časopisu, více informací zde:*

http://www.rmi.cz/index.php?ref=7&child_id=338

Zařízení GDA2 je PRIMÁRNĚ určeno pro First Responders, tedy pro velmi rychlou detekci v místě incidentu a schopnost detekce v širokém rozsahu koncentrací (od potenciálních teroristických útoků bojovými chemickými látkami až po průmyslové havárie). Rychlost analýzy a snadnost obsluhy byly prioritou při vývoji tohoto zařízení. Není tedy určeno pro přesné analýzy, případně pro analýzy složitějších směsí plynů, kdy se již neobejdeme bez separačního kroku na začátku analýzy, což je zpravidla plynová chromatografie (GC – Gas Chromatography). Separační krok prodlužuje dobu reakce zařízení a samozřejmě komplikuje obsluhu i provoz zařízení.

Pro následné konfirmační analýzy (provádí zpravidla špičkové mobilní laboratoře, které se na místo incidentu musí dostat v určeném časovém limitu) se nejčastěji používají plynové chromatografy s hmotnostní spektrometrií (GC-MS). Nejjednodušší zařízení využívají kombinaci s IMS hmotnostními spektrometry (spektrometry pohyblivosti iontů). Jejich výhodou je nízká cena, velmi malé rozměry a malé nároky na vakuum uvnitř spektrometru. Poskytují velmi malé rozlišení, navíc jejich propojení s GC není zcela ideální. Toto řešení není příliš vhodné pro skutečně náročné konfirmační analýzy a v současné době se od něj již upouští. Druhou možností je spojení s kvadrupólovým analyzátozem. Toto je doposud nejrozšířenější technologie. Kvadrupólové analyzátory poskytují podstatně lepší rozlišovací schopnost, mají ale podstatně vyšší nároky na dosažení nízkého vakua uvnitř analyzátoru a mají i větší rozměry a nároky na napájení. Třetí a nejnovější možností je využití hmotnostního analyzátoru na bázi iontové pasti. Iontová past má totiž několik výhod. Je možné ji zkonstruovat s malými rozměry při zachování velmi dobrého rozlišení. Iontová past má také menší nároky na vakuum a napájení než kvadrupóly (a tím je možné použít menší a jednodušší vakuové pumpy) a zejména poskytují možnost vícerozměrné MS analýzy tzv. MS/MS, případně MSⁿ, což výrazně zvyšuje rozlišovací schopnost. Teoreticky je tak možné velmi selektivně detekovat miliony těkavých nebo semi-těkavých látek a to v různých směsích. Obrázek 4 ukazuje jak vzrůstá rozlišovací schopnost/informační výkonnost jednotlivých technik (od prostého IMS bez GC separace až po GC-MS/MS).

Obr. 4 Vzrůst rozlišovací schopnosti/informační výkonnosti jednotlivých technik.

Technique	Increase in Informing Power
IMS	1
MS	10
Capillary GC-MS	10,000
MS/MS	10,000
GC/MS/MS	10,000,000

Naše firma RMI nyní uvádí na trh České a Slovenské republiky **unikátní GC-MS/MS** systém firmy Gryffin (Obr. 5) Analytical z USA, které je určeno pro HAZMAT, vojenské a kriminalistické mobilní laboratoře. Toto zařízení využívá technologie cylindrické iontové pasti o malém objemu. Podařilo se tak zkonstruovat zařízení o malých rozměrech s přijatelnou hmotností a velkou robustností vyhovující nasazení v mobilní laboratoři. Při konstrukci navíc bylo dbáno na to, aby zařízení **mělo nízké provozní náklady** (jsou prakticky shodné s běžnými laboratorními systémy).

Je použitelné na bojové chemické látky, jejich prekurzory i produkty degradace, průmyslové toxické látky, těkavé organické látky, drogy, výbušniny, pesticidy, fungicidy a další látky. Detekční limity jsou v jednotkách až desetínách ppb pro plynné látky a od jednotek ppm až do stovek ppb pro kapaliny. S předkoncentrací na sorpční jednotce X-Sorber (Obr. 6), která je součástí zařízení, se detekční limity posouvají až k hodnotám ppt u plynných látek. X-Sorber umožňuje velmi snadné vzorkování přímo v terénu (je velmi lehké, kompletně dekontaminovatelné, je vybaveno integrovaným GPS modulem).

Obr.5 Griffin 450

Griffin 450



Key Applications

- Mobile laboratories
- Government lab research
- Site assessment & remediation
- Urban air monitoring
- Forensics



Analyzer: Cylindrical Ion Trap (CIT)	Pumps: Miniature turbo molecular pump & Miniature quad diaphragm pump (contained within instrument pictured)	Gas Chromatograph: LTM-GC, user-selected columns, fast-GC operation, up to 280° C/min (Column dependent) GC Carrier Gas (choice of He or H ₂) available from many sources	Dimensions: 19.2" x 19.2" x 21.1"
Software: NIST License with AMDIS subset included with Griffin System Software, user-defined library capabilities	NO EXTERNALS NEEDED!!!!!!	Weight: 96 lbs.	

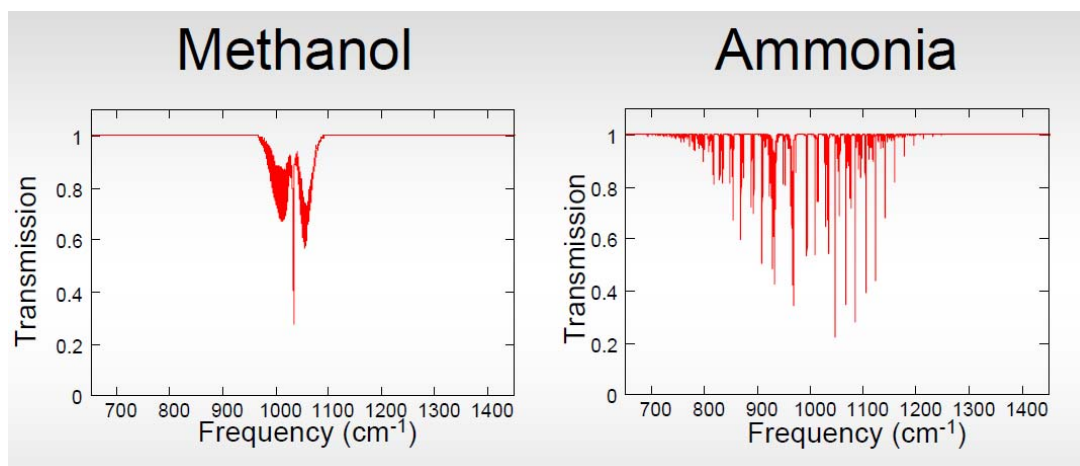
Obr. 6 X-Sorber



Máte-li zájem o podrobnou prezentaci, aplikační listy nebo více informací o systémech Griffin, prosím neváhejte a kontaktujte nás (sale@rmi.cz).

Další novinkou je **systém SIGIS** od německé firmy Air Sense. Jedná se o novou technologii, která využívá pasivní infračervenou absorpční spektrometrii a umožňuje současné prostorové skenování. Postupně se měří infračervená absorpční spektra, kde jako zdroj infračerveného světla slouží pozadí atmosféry nebo terénu (pasivní technologie). Postupně je skenována určitá oblast s úzkým prostorovým úhlem. Obdržíme obraz (mapu), kde každému bodu přísluší kompletní IR spektrum získané FT IR spektrometrem s vysokým rozlišením (ukázky spekter methanolu a amoniaku jsou na obrázku 7). Jsme tak schopni nejen detekovat přítomnost nebezpečných látek, ale získat i informaci o jejich rozložení a šíření terénem, v případě že danou oblast snímají dvě zařízení SIGIS současně z různých míst můžeme získat i informaci o 3D rozložení a šíření škodlivin prostorem.

Obr. 7



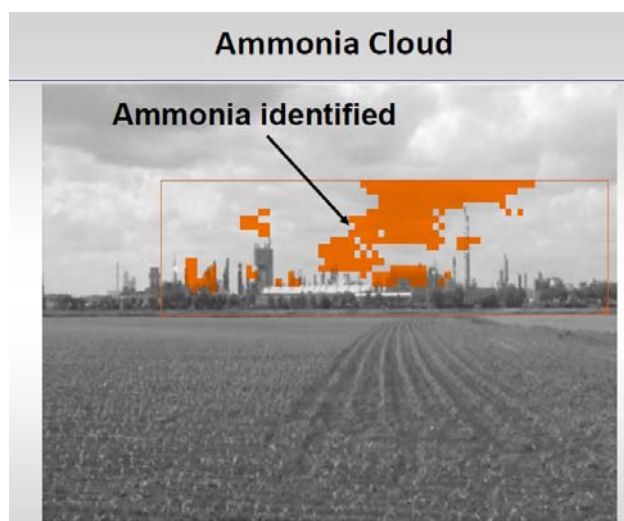
Zařízení SIGIS se skládá ze skenující jednotky s parabolickým zrcadlem a z rychlého FT-IR spektrometru (obr. 8) a může být umístěno v automobilu, helikoptéře nebo na vhodně zvoleném stacionárním místě.

Obr. 8 Systém SIGIS

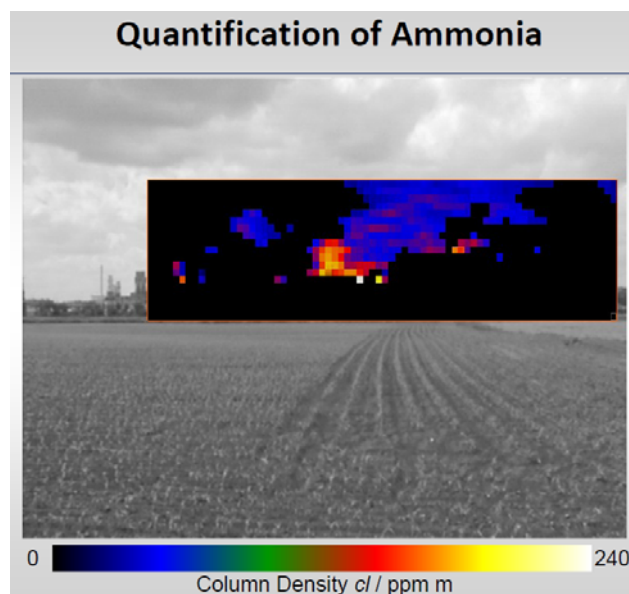


Zařízení umožňuje nejen identifikaci, ale i odhad koncentrace. Typické výstupy jsou na Obrázku 9 a 10. Vysokou citlivost demonstruje obr. 11. Zařízení je schopno detekovat i přítomnost alkoholu ve vydechovaných parách během koncertu rockové skupiny.

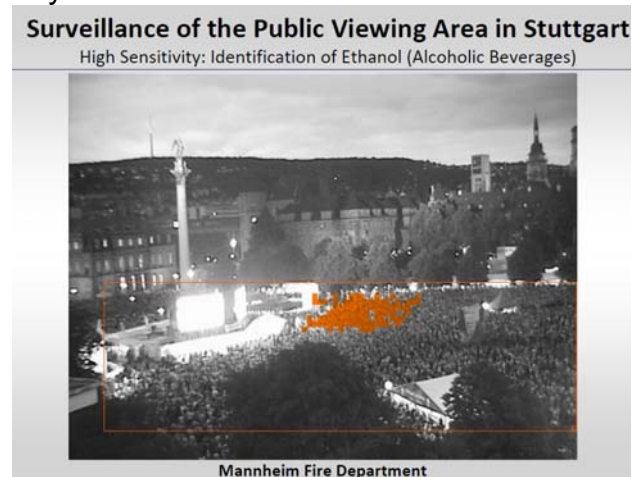
Obr. 9 Ukázka identifikačního výstupu ze zařízení SIGIS.



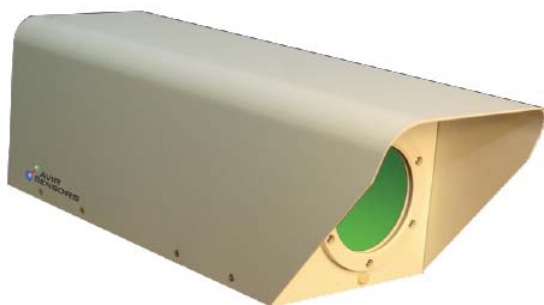
Obr. 10 Ukázka kvantifikačního výstupu ze zařízení SIGIS.



Obr. 11 Demonstrace vysoké citlivosti zařízení SIGIS.



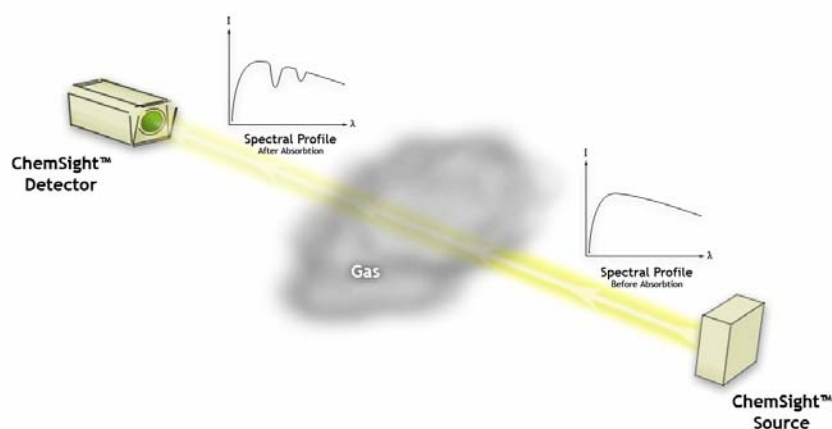
Oblast bezpečnostních technologií



V oblasti bezpečnostních technologií se jedná o informace věnované novým multispektrálním IR aktivním detektorům nebezpečných látek ChemSight od firmy Avir Sensors. Ty využívají, na rozdíl od systému SIGIS, aktivní technologii (na jedné straně máme nainstalovaný emitör (zdroj přesně definovaného IR záření) a na druhé straně

pak multispektrální IR detektor. Vzdálenost mezi zdrojem a detektorem je tak přesně definována. Princip funkce je patrný z Obr. 12. *Tyto detektory mají jiné určení než systém SIGIS*, používají se optické dráhy od několika metrů až po maximálně 120 m, jsou tak **ideální pro monitorování významných budov, areálů nebo rizikových chemických provozů**. Jedno zařízení je s vysokou citlivostí schopno pokrýt poměrně velkou plochu. To je zásadní rozdíl oproti tzv. bodovým detektorům (IMS, fotoionizační detektory, ...), které analyzují skutečně jen v místě odkud nasávají analyzovaný vzorek. Oproti těmto „bodovým“ detektorům se navíc detektory Chemsight vyznačují velmi vysokou spolehlivostí a zcela bezúdržbovým provozem (jsou nasazeny například k ochraně metra a hlavního vlakového nádraží ve Washingtonu a nově jsou instalovány například v londýnském metru). Současně se dosahuje i velmi příznivé ceny a prakticky nulových provozních nákladů, což umožňuje poměrně široké nasazení těchto detektorů.

Obr. 12 Základní schéma aktivní IR technologie pro detekci nebezpečných látek



Hlavní přednosti detektorů ChemSight

Vysoká rychlost analýzy – odezva 1 s nebo 30 s.

Vysoká spolehlivost identifikace (vynikající ROC křivky).

Široké spektrum detekovaných látek – *bojové chemické látky, průmyslové toxické látky, běžné průmyslové plynné látky a další.*

Možnost rozšiřování knihoven o další látky.

Velmi snadná vzdálená správa – každé zařízení má vlastní IP adresu, velmi snadno můžete z jednoho PC monitorovat stav mnoha detektorů, provádět vzdálené testování, monitorovat interní stav detektoru, každý detektor je vybaven také videokamerou – můžete sledovat fyzické dění ve sledovaném prostoru.

Nízká cena a nulové provozní náklady.

Zcela bezobslužný provoz.

Chcete-li získat více informací o detektorech ChemSight od firmy AVIR Sensors, máte-li zájem o aplikační listy, prezentaci nebo demonstraci zařízení, neváhejte a kontaktujte nás.

[RMI, s.r.o.](#)

Pernštýnská 116

533 41 Lázně Bohdaneč

tel: 466 921 404

fax: 466 921 885

e-mail: sale@rmi.cz

www.rmi.cz