



V dnešních Safety News naleznete:

- Pozvání na výstavu Future Forces a CBRN Kongres a Workshop
- typy na využití speciálních algoritmů pro identifikaci sledovaných látek ve složitých směsích (tzv. funkce tagging u spektrometrů firmy Thermo POA) s příklady z oblasti celní a forezní praxe
- novinky od firmy Thermo POA
- možnost volného stažení dvou zajímavých brožur, jedna je věnovaná problematice stopové detekce výbušnin a druhá pak volbě vhodného detektoru pro měření radiace
- co připravujeme pro další číslo - článek o využití mobilních GC-MS spektrometrů pro identifikaci markerů v palivech a pro kontrolu kvality paliv, první podrobnější informace o novém ručním hmotnostním spektrometru MX908 - hodně očekávané novince pro konec roku 2016 a další a také informace o unikátním mobilním spektrometru Griffin AI-MS - robustní (splňuje podmínky MIL STD) mobilní MS platformě využívající techniku DESI.



Ve dnech 19.10. až 21.10. se v Praze na výstavišti v Letňanech koná významná mezinárodní akce – výstava Future Forces. Spolu s výstavou probíhá řada odborných akcí, mimo jiné [World CBRN & Medical Congress \(CEBIRAM\)](#) – jedna z nejvýznamnějších světových akcí z oblasti CBRN a [CBRN Workshop](#). V rámci CBRN Workshopu vystoupí také Mr. Trey Sieger s přednáškou „**Advancing CBRN Detection Systems in the Field and their Role in CBRN Forensics**“ z firmy [908 Devices](#). Nenechte si ujít tuto přednášku, dozvíte se informace o nových technologiích z dílny momentálně nejnovativnější firmy v oblasti detekčních technologií.

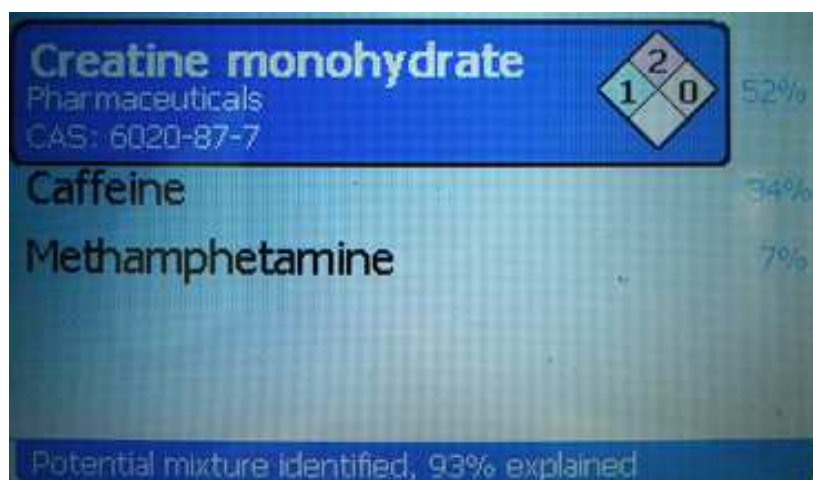
Naše firma RMI bude mít stánek číslo **324** najdete nás v hale H3 hned naproti NATO Corner and meeting point. Na našem stánku naleznete přístrojovou techniku firem Thermo POA (kompletní sortiment ručních Ramanových a FT-IR spektrometrů), FLIR CBRN Systems (přístroje pro měření

radiace a identifikaci izotopů, ultrastopovou detekci výbušnin a chemickou detekci), AirSense (přístroje pro detekci toxických plynů na bázi detektorových polí, včetně novinky – osobní detektor s novou generací IMS) a 908 Devices – ruční hmotnostní spektrometr M908 a světová premiéra předprodukčního modelu nového spektrometru MX908. Více informací o těchto produktech naleznete na našich stránkách zde: <http://www.rmi.cz/bezpecnostni-aplikace>

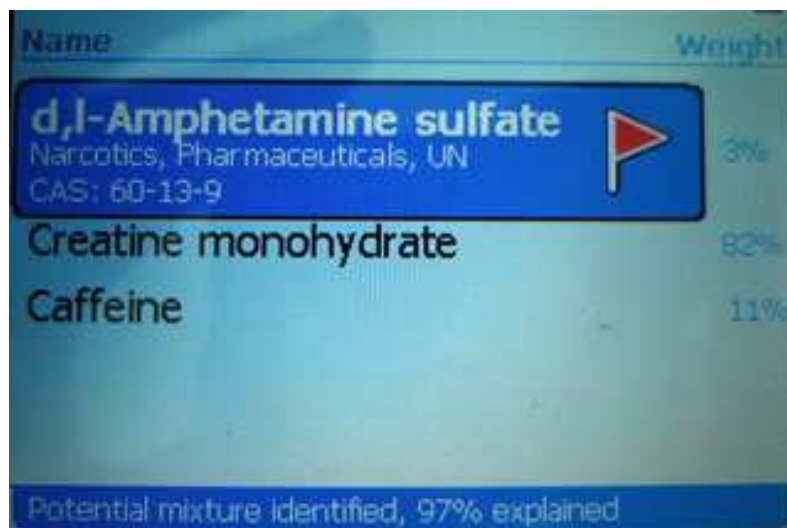
Identifikace sledovaných látek ve složitých směsích – funkce tagging a její další možnosti využití při verifikaci výsledků tradiční multi-komponentní analýzy směsí.

Moderní metody klasické analýzy směsí u Ramanových a FT-IR spektrometrů využívají různé statistické metody, kdy se generují vhodné kandidáti kombinací spekter čistých látek ze spektrální knihovny a srovnává se shoda (nebo neshoda) se skutečně změřeným spektrem. V případě výrobků firmy Thermo POA se pro srovnání používá pravděpodobnostní analýzy, která velmi citlivě sleduje rozdíly (neshody) mezi spektry. Tato technologie je velmi úspěšná pro identifikaci hlavních komponent směsí, může ale selhávat při identifikaci nízkých koncentrací, při identifikaci látek se slabým Ramanovým spektrem v přítomnosti dalších látek s intenzivním Ramanovým spektrem a u spektrálně složitých směsí (Raman i FT-IR). V těchto případech je vhodnější využít jiné algoritmy, které cíleně ve spektrech hledají sledované látky. Tyto algoritmy byly původně firmou Thermo POA vyvinuty pro přístroj TruNarc, který se používá pro analýzu pouličních vzorků narkotik a sledovaných látek. To jsou vzorky kde se typicky setkáváme se silně proměnou matricí (různé ředící a maskovací látky) a velmi často relativně nízkými obsahy sledované látky. Následně firma Thermo POA přenesla z velké části tuto technologii také do svých spektrometrů pro bezpečnostní aplikace – FirstDefender RM a RMX. Při zapnutí funkce tagging spektrometry zcela automaticky provedou jak standardní analýzu směsí, tak následně cíleně vyhledávají i látky na tagging listu sledovaných látek. Obsluha si může vytvořit neomezený počet „tagging listů“. Tato technologie výrazně rozšiřuje schopnosti identifikace kontrolovaných látek u reálných vzorků. Následně zde ukážeme některé příklady se kterými jsme se setkali při analýze reálných vzorků.

První případ je z celní praxe. Jednalo se o vzorek, u kterého zákazník měl ověřeno složení metodou GC-MS, směs amfetamin sulfátu, kreatinu a kofeinu. Vzorek obsahoval relativně nízkou koncentraci amfetaminu. Zákazník zkoušel měřit vzorek na stolním Ramanově spektrometru s následnou automatickou analýzou v software Omnic a také na třech typech ručních Ramanových spektrometrů vybavených analýzou směsí. Stolní spektrometr a dva ruční spektrometry ale poskytly výsledek směs kreatinu, kofeinu a metamfetaminu, třetí spektrometr poskytl výsledek pouze směs kreatinu a kofeinu. Vzorek jsme zkoušeli měřit na spektrometru [FirstDefender RMX](#) s vypnutou funkcí tagging. Dostali jsme stejný výsledek jako obdržel zákazník při předchozích testech na jiných Ramanových spektrometrech – tedy směs kreatin, kofein a metamfetamin (viz obrázek níže). Zastoupení metamfetaminu v celkové ploše spektra bylo pouze 7%, což jednoznačně indikovalo relativně nízký obsah této látky.



Následně byla zapnuta funkce tagging a zvolen tagging list pro narkotika, ve kterém byly na list vloženy také všechny typy amfetaminů (d,l-amfetamin hydrochlorid, d-amfetamin hydrochlorid, d,l-amfetamin sulfát, d-amfetamin sulfát). Funkce tagging používá k analýze cílené prohledávání spektra a při použití této funkce jsme již obdrželi **správný výsledek** (viz obrázek níže). U těchto algoritmů zároveň dochází k podstatně přesnějšímu určení skutečné plochy spektra příslušné látky v celkové ploše spektra vzorku. Je vidět, že určená látka ve skutečnosti zabírá pouze 3% z celkové plochy spektra a přesto byla správně identifikována. Vzorek jsme také analyzovali na specializovaném Ramanově spektrometru TruNarc a ten jednoznačně určil, že vzorek obsahuje amfetamin. Spektrometr v zobrazení výsledků automaticky posouvá na první místa ve skóre ty látky, které jsou na tagging listu (označeno červeným praporkem), přestože plocha spektra nalezené látky je nižší než u ostatních komponent směsi.



Zde je nutné si uvědomit, že **záměna amfetaminu za metamfetamin má v celní nebo forenzní praxi skutečně zásadní význam a nejedná se o marginální problém.**

Dalším příkladem (opět z celní praxe) byla identifikace nižší koncentrace kokainu v bílém víně. Jednalo se o vzorky, kde byl kokain rozpuštěn ve víně, spektrometr FirstDefender RM byl při zapnutém tag listu pro narkotika schopen identifikovat kokain i při přímém měření přes obal (skleněná láhev). S vypnutou funkcí tagging nebylo možné kokain identifikovat a to ani při měření ve vialce (po odběru) .

Dalším způsobem využití funkce tagging je ověření výsledků klasické analýzy směsí u zcela neznámých vzorků. Velmi často se stává, že analýza směsí poskytne výsledek, kde nalezená látka zaujímá malou plochu z celkového spektra (typicky pod 5% plochy). U těchto výsledků je potřeba ověřit správnost analýzy, zejména jedná-li se o významné látky (toxická látka, droga, kontrolovaná sloučenina) s plochou méně jak 3%. U spektrometrů, které disponují funkcí tagging je možné k ověření použít tuto funkci. V prvním kroku je automaticky provedena analýza směsí, výsledkem je výsledkový list, kde některá látka zaujímá plochu menší jak 5%. Následně je možné otevřít nový tag list a tuto látku vložit na tento list a znovu zopakovat analýzu. Pokud je výsledkem list, kdy je „sporná“ látka posunuta na první místo je vysoká pravděpodobnost, že je přítomna ve vzorku. V případě, kdy ale nedojde k určení této látky je naopak vysoká pravděpodobnost, že daná látka není ve vzorku přítomná. Viz například identifikace látky dimethyl methylfosfonát v roztoku chloroformu. Standardní analýza poskytla výsledek, kde byla tato látka identifikována, nicméně s plochou pouze 3%, tedy ne zcela věrohodným výsledkem. Následně byla přidána na tag list a analýza byla provedena znovu s potvrzením přítomnosti této látky v chloroformu. Výsledek byl poté ověřen metodou hmotnostní spektrometrie.

Session004 : Scan013	
Name	Weight
Dimethyl methylphosp... EPA-HVP 1990, UN CAS: 756-79-6	4%
Chloroform	93%
Potential mixture identified, 97% explained	

Novinky u spektrometrů firmy Thermo POA (Portable Optical Analyzers)

Firma Thermo Scientific (divize POA) se stala dodavatelem **World Custom Organization**. Tato organizace se rozhodla pro globální použití ručních Ramanových spektrometrů FirstDefender RM a hlavně RMX v rámci svých aktivit a rozvojové pomoci. Spektrometry Thermo POA používá nejvíce členských zemí této organizace. Kromě robustnosti hardware a použitých algoritmů je velkou výhodou snadný přenos spekter mezi knihovnami všech spektrometrů FirstDefender bez vlivu na identifikační výkonnost spektrometru (patentovaná technologie).

Nová knihovna pro spektrometry TruNarc. V minulém týdnu firma Thermo POA uvedla na trh další generaci knihovny a firmware pro spektrometry TruNarc, uživatelé spektrometrů si ji tak mohou snadno zdarma nahrát do svých spektrometrů. Nová verze 1.6 přináší další rozšíření knihovny, včetně řady nových syntetických drog (také mediálně známé nové drogy W-18). Opět došlo k další optimalizaci algoritmů v souvislosti s ověřováním na reálné pouliční drogy. Výkonnost knihovny a použitých algoritmů je ověřována ve spolupráci s globální sítí partnerů na reálných pouličních vzorcích, teprve po tomto ověření je daná látka vložena do knihovny spektrometru. Verze 1.6 také přináší další rozšíření látek měřitelných se SERS technologií/SERS substráty (povrchově zesílená

Ramanova spektrometrie). Díky této technologii je možné měřit i velmi intenzivně fluoreskující vzorky neměřitelné i při použití laseru s vlnovou délkou 1064 nm (například některé vzorky MDMA masivně probarvené fluorescenčními barvivy), nebo vzorky s velmi nízkým obsahem účinné látky (kontrolovaná – zneužívaná léčiva s nízkou koncentrací účinné látky).

Úspěch spektrometrů Gemini. Kombinované FT-IR/Raman spektrometry Gemini přinesly řadu technologických novinek a jsou jedinými ručními spektrometry kde je v přístroji o hmotnosti nižší jak 2 kg integrován výkonný Ramanův spektrometr se sondou a kvalitní FT-IR spektrometr s rozlišením 4 cm^{-1} . I přes vyšší cenu si spektrometry velmi rychle našly cestu nejen k armádním uživatelům, velmi oblíbenými se staly u HAZMAT týmů a terénních forenzních týmů. Přináší nejen zvýšení detekčních schopností, ale zejména podstatně vyšší bezpečnost obsluhy (momentálně vysoké riziko setkání se s podomácku vyráběnými výbušninami) a možnost provedení konfirmační analýzy v případě forenzní analýzy. Ta požaduje ověření výsledků jednou z primárních technik (GC-MS, FT-IR, Raman), přístroj Gemini disponuje dvěma primárními technikami, pro vzorky, které jsou aktivní jak v Raman tak i v FT-IR. Je tak možné snadno přímo v terénu provést také konfirmační analýzu. [Více informací zde.](#)

Nové zajímavé brožury volně ke stažení.

Firma FLIR připravila dvě zajímavé brožury. První je věnovaná problematice ultrastopové detekce výbušnin s ručními detektory. Brožuru s názvem *"10 Things You Need to Know About Handheld Explosives Trace Detectors"* si můžete stáhnout zde:

http://www.rmi.cz/download.php?group=stranky3_soubory&id=1988

Druhá brožura je věnovaná problematice ručních detektorů radiace s identifikačními schopnostmi. Brožuru s názvem *"10 Things to Consider Before Buying a Handheld or Belt-Worn Radiation Detector"* si můžete stáhnout zde:

http://www.rmi.cz/download.php?group=stranky3_soubory&id=1989

Novinky pro další číslo

Přelom letošního roku přinese řadu novinek. Některé z nich jsme měli možnost již vidět a máte se opravdu na co těšit – objeví se novinky jak z oblasti hmotnostní spektrometrie, tak i spojení hmotnostní spektrometrie se separačními technikami (GC a CE). První „ochutnávkou“ bude představení nového ručního hmotnostního spektrometru MX908 využívajícího principu HPMS (High Pressure Mass Spectrometry) během výstavy Future Forces. Této technologii bychom se také chtěli věnovat více v našem příštím čísle. Najdete zde ale také zajímavý článek věnovaný využití mobilních GC-MS spektrometrů v problematice analýzy paliv (jedná se tedy zejména o celní problematiku).

Přejeme Vám příjemné prožití zbytku babího léta a těšíme se na setkání s Vámi na výstavě [Future Forces](#).

Tým pracovníků firmy RMI, s.r.o.

RMI, s.r.o.
Horka 221
533 41 Lázně Bohdaneč

Tel.: +420 466 921 404, +420 466 921 885
e-mail: sale@rmi.cz
www.rmi.cz