



Safety **News** No.19:

V minulých číslech jsme Vás pravidelně informovali o jednotlivých epizodách videokurzu FLIR PRIMED. Tento kurz se celosvětově stal velmi populární zejména u pracovníků z oblasti HAZMAT a First Responders. Všech doposud vydaných 25 epizod si můžete nyní prohlédnout na odkazu níže. Ke každé epizodě si můžete stáhnout krátký podpůrný materiál, dva příklady naleznete v příloze této zprávy (krátký instruktážní materiál pro First Respondery ohledně výbušných systémů, checklist pro případ radiálního nálezu/nehody).

<https://www.flir.com/threat-detection/primed/>

FLIR PRIMED



Nová „kritická spektra“ pro mobilní Ramanovy a FT-IR spektrometry firmy Thermo.

V minulém čísle jsme Vás informovali o pravidelném doplňování knihoven spektrometrů FirstDefender RM/RMX, TruDefender FT/FTX a kombinovaného spektrometru Gemini od firmy Thermo Scientific. Zaregistrovaným uživatelům výše uvedených spektrometrů nyní v období mezi standardními upgrady zasíláme zip soubory se spektry/látkami, které si mohou jednoduše přidat do knihovny spektrometru. V řadě případů se jedná o zcela unikátní data jinak nedostupná. Veškerá spektra byla změřená na spektrometrech Thermo POA a díky patentované technologii je zajištěna jejich maximální funkčnost na všech spektrometrech Thermo POA (identifikační výkon není ovlivněn přenosem spekter na další spektrometry Thermo POA).

V minulých týdnech jsme rozesílali další dávku spekter, tentokrát hlavně zaměřenou na výbušniny (obsahuje také ale spektrum jedné velmi důležité nové syntetické drogy). Pokud jste uživatelem některého z výše uvedených spektrometrů a doposud jste od nás tyto spektra nedostali, prosím kontaktujte nás.

Novinky v oblasti firmware a software pro některé přístroje, během prázdnin se objevila řada zajímavých upgrade.

1. Kombinovaný FT-IR/Raman spektrometr Gemini

První novinka se týká nového firmware pro přístroje **Gemini** od firmy Thermo Scientific. Uživatelé si mohou nyní upgradovat přístroj na verzi firmware 1.6, která kromě vylepšení algoritmů, rozšíření knihovny o další nové syntetické drogy (nyní více jak 14 000 látek v knihovně) **přináší také KOMPLETNÍ lokalizaci do ČESKÉHO JAZYKA!**



Gemini je naše „vlajková loď“ v oblasti identifikace neznámých látek. Přístroj s hmotností pod 2 kg v sobě spojuje vysoce výkonný Ramanův spektrometr s integrovanou pancéřovanou sondou a FT-IR spektrometr s laboratorní kvalitou a unikátním motorizovaným přitlakem vzorku na ATR diamantový krystal. To vše v odolném provedení splňujícím nejen nejvyšší požadavky armády USA, ale zejména v provedení ověřeném nasazením v mnoha vysoce náročných bojových a inspekčních misích v nejnáročnějších klimatických podmínkách. Gemini v současné době představuje nejkomplexnější řešení, které je ale zároveň nejbližší vlastním uživatelům. Díky unikátním technologiím je zajištěna správná a na chybu obsluhy odolná identifikace širokého spektra vzorků, přičemž obsluha nemusí mít žádné znalosti z oblasti spektrometrie nebo speciálních znalostí ohledně nastavování přístroje. Spektrometr Gemini se za posledních 18 měsíců účastnil několika srovnávacích testů při identifikaci

reálných vzorků drog, výbušnin a jejich prekurzorů a to jak v ČR, tak i v dalších Evropských zemích (často více jak 50 vzorků s širokým spektrem látek). Ve VŠECH případech byl hodnocen jako nejlepší přístroj v testu a to nejen počtem úspěšně identifikovaných látek, ale i z hlediska minimálních nároků na nutnost zásahů ze strany obsluhy nebo schopnosti měřit vzorky přes různé obaly bez nutnosti manipulace s vlastním vzorkem, případně identifikovat velmi malá množství vzorku.

Více o přístroji Gemini naleznete na následujících odkazech:

<http://www.rmi.cz/gemini-novinka>

2. Nový firmware a knihovna pro přístroje TruNarc.

Firma Thermo před prázdninami uvolnila další generaci knihovny a softwaru pro spektrometry **TruNarc**. Uživatelé si mohou provést automaticky upgrade ze software spektrometru (po připojení k síti Internet), nebo nás mohou kontaktovat pro offline upgrade.

Nová knihovna přináší rozšíření o nové deriváty fentanylu (obsahuje vždy všechny dostupné sole a isomorfy), nové cathinony a cannabinoidy a zvláště pak nové deriváty MDMA a T-BOC (4-Fluoroisobutyrylfentanyl (FIBF), alpha-Methyl acetylfentanyl, T-BOC MDMA, T-BOC Methamphetamine, T-BOC Pseudoephedrine, 6-Chloro-MDMA, 6-Bromo-MDMA). Zároveň byly dále optimalizovány identifikační algoritmy spektrometru. Rádi bychom připomněli, že spektrometry TruNarc používají unikátní technologii, která je odlišuje od všech ostatních v současnosti dostupných Ramanových spektrometrů umožňujících analýzu drog.

TruNarc je kapesní přístroj, který je zaměřen na identifikaci drog a jejich prekurzorů včetně pouliční kvality vzorků (často složité směsi s vyšším stupněm ředění). Přístroj byl od samého počátku konstruován jako specializovaný nástroj pro přímé použití v terénu pracovníky po základním zaškolení, bez nutnosti znalostí vlastní techniky Ramanovy spektrometrie a s maximálními schopnostmi při analýze reálných vzorků. Tyto požadavky se promítly nejen do konstrukce hardwaru, ale zejména do oblasti algoritmů a práce se získanými spektry. Spektrometry používají speciální technologii, která se liší od všech ostatních spektrometrů na současném trhu a která je výsledkem mnohaletého výzkumu a optimalizací na základě měření reálných vzorků z celého světa (jedná se o skutečně globální technologii, firma Thermo spolupracuje s partnery po celém světě). Současná verze software je již **OSMOU generací** a kromě rozšíření knihovny přináší také další vylepšení v oblasti algoritmů analýzy a to včetně SERS analýzy (spektrometry TruNarc byly první, které začali komerčně využívat SERS technologii, firma Thermo vyrábí již mnoho let vlastní SERS substráty).

3. Novinky pro mobilní MS spektrometry MX908

Firma 908 Devices (výrobce spektrometru **MX908**) uvolnila během prázdnin hned dva zásadní upgrade pro spektrometry MX908. Přístroje MX908 jsou mobilní ruční hmotnostní spektrometry, které využívají technologii miniaturizované iontové pasti pracující za zvýšeného tlaku (HPMS). Vývoj hardwaru těchto spektrometrů je již ukončen (poslední úpravy proběhly před více jak jedním rokem), zásadní vývoj ale pokračuje na poli firmware a software. S každým dalším upgrade se výrazně zvyšují

detekční schopnosti těchto přístrojů, přibývají nové funkce a zvyšuje se komfort obsluhy. Jeden z předchozích upgradů přinesl zásadní inovaci – kolizně indukovanou Ionizaci (CID). V první fázi byla tato technika využívána pro detekci a identifikaci drog, zejména se zaměřením na stopovou detekci fentanylu a jeho derivátů. Různé deriváty fentanylu se extrémně liší svojí toxicitou, jejich správná identifikace i ve stopových množstvích je tedy nesmírně důležitá pro všechny pracovníky, kteří mohou přijít do styku s těmito látkami. Více o technice CID a o tom, jak řeší problematiku fentanylu a jeho derivátů, naleznete v samostatném oddíle níže. Nový upgrade 1.3 přináší tuto techniku také do oblasti detekce a identifikace výbušnin, zásadně se také změnila filosofie přístupu k analýze. Přístroj nyní nabízí jeden základní pracovní mód nastavený na co nejvíce univerzální analýzu a řadu tzv. „Mission“ módů zaměřených na detekci specifických kategorií látek s vysokou selektivitou identifikace, případně se zaměřením na extrémně nízké detekční limity (detekce bojových chemických látek). Upgrade 1.3 a 1.4 pak spolu přináší řadu novinek v grafickém rozhraní (automatické instruktážní sekvence, zjednodušení ovládání) i řadu nových funkcí.

Nové informace ke spektrometrům MX908



Ruční hmotnostní spektrometry **MX908** umožňují jak detekci vysoce toxických a nebezpečných látek v plynné fázi, tak i stopovou detekci stěrů z povrchu (temodesorpční technologie). Přístroje MX908 se tak nyní stávají ideální platformou pro rychlou detekci a identifikaci širšího spektra nejnovějších hrozeb. Přístroje jsou určeny pro přímou a rychlou analýzu v terénu včetně hot zóny, pro přímé použití běžně zaškolenou obsluhou, a to s naprosto zanedbatelnými provozními náklady.

S rychlým vývojem schopností těchto spektrometrů také výrazně vzrůstá zájem o tyto přístroje. V USA velmi rychle vzrůstá prodej těchto spektrometrů (zejména pro řešení fentanylové krize a v oblasti First Responders), MX908 se ale začíná významně prosazovat i Evropě. V ČR je již nainstalováno více jak 10 zařízení. MX908 byl také již několikrát úspěšně použit při vyhledávání skrytých zásilek fentanylu.

Spektrometry **MX908** byly v dubnu letošního roku úspěšně testovány pro detekci a identifikaci bojových látek, výbušnin a Fentanylu v renomovaných laboratořích TNO (Holandsko), souhrnný report si je možné vyžádat u naší firmy (detekční limity, odolnost proti různé vlhkosti, rychlost reakce na sledovanou látku, rychlost čištění po expozici, ...).

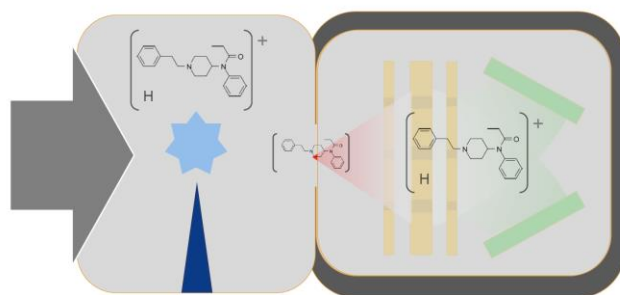
Nové informace k mobilním GC-MS Griffin G510



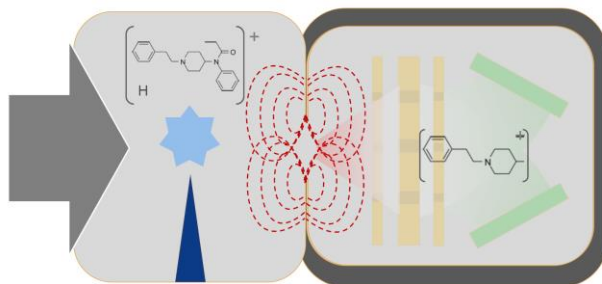
Mobilní GC-MS systém **Griffin G510** přinesl zásadní průlom na trhu mobilních GC-MS. Poprvé je k dispozici skutečně mobilní zařízení (váha menší jak 17 kg) s plnohodnotným kvadrupolovým MS spektrometrem a plnohodnotným vakuovým systémem (plná kompatibilita s NIST knihovnami), fast GC pracujícím s He ne H_2 do 300°C a kompletním sortimentem různých způsobů zavádění vzorku (plnohodnotný split/splitless nástřik, SPME, přímý vstup plynné fáze na MS, integrovaná termální sorpce/desorpce s vyhřívanou odběrovou sondou, přímá GC-MS analýza mikromnožství pevné a kapalné fáze, ...). Přestože se jedná o „horkou“ novinku tento přístroj si již zvolila řada „First responders“ pracovišť ve světě jako nové řešení mobilní GC-MS analýzy. Doposud ale nebyly k dispozici data z nezávislého testování na širší spektrum složitějších vzorků. Přístroj byl nyní úspěšně testován renovovanou nezávislou zkušebnou **MRI** v USA (MRI pracuje také pro vládu USA) – test na směs 56 látek (US EPA 8270), směs výbušnin (US EPA 8330) a na speciálně připravený směsný vzorek. Dále byl přístroj také testován v laboratořích **NFSC** (National Forensic Science Technology Centre (USA) – drogy a přímá analýza plynné fáze. Výsledky z těchto testů jsou pro zájemce k dispozici u naší firmy.

Technologie CID a její využití při identifikaci derivátů fentanylu

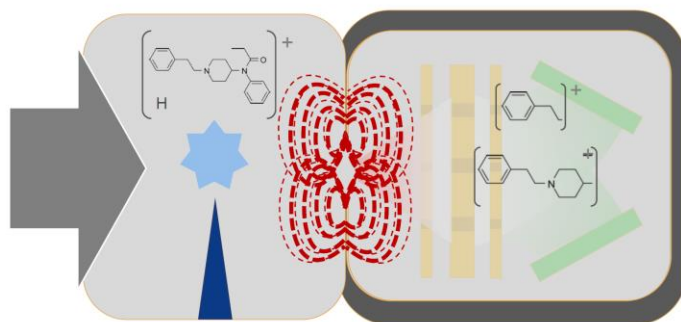
Ruční mobilní přístroj MX908 používá miniaturizovanou iontovou past, která pracuje za zvýšeného tlaku (tzv. High Pressure Mass Spectrometry – HPMS). K ionizaci se využívá APCI atmosférická kolizní ionizace (Atmospheric Pressure Collision Ionization), která je schopna tvořit vysoké koncentrace pozitivně i negativně nabitých iontů (zvyšuje se tím identifikační schopnost a citlivost techniky). Použitá ionizační energie současně ovlivňuje také proces následné disociace iontů, změnou této energie můžeme citlivě ovlivňovat disociaci/fragmentaci iontů a tím odlišit hmotnostně podobné látky lišící se ale fragmentačním mechanismem. Pokud se změna energie provádí velmi rychle během jedné analýzy, můžeme získat komplexní informaci o vzorku – této technice pak říkáme CID (Kolizně indukovaná disociace). Princip je znázorněn na obrázcích níže.



CID Low (nízká energie, nízká fragmentace. Ve spektru převažuje mateřský iont)



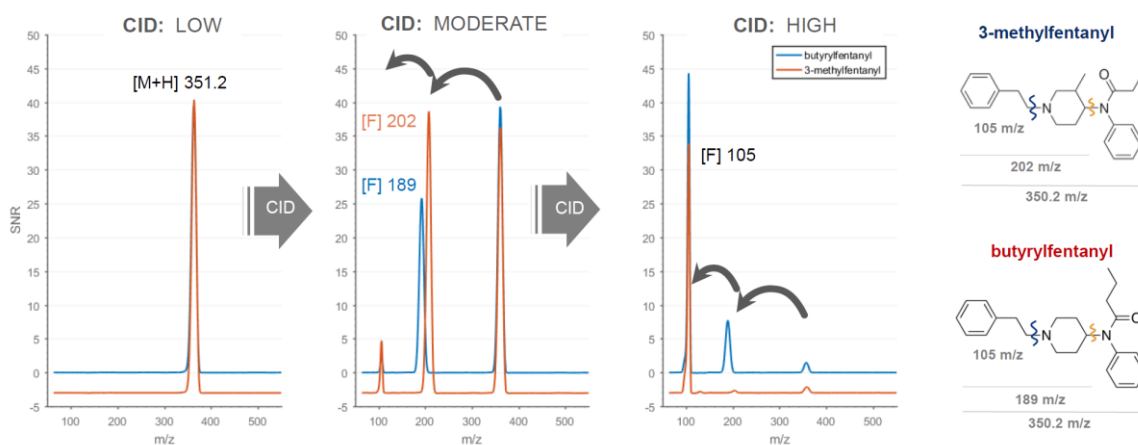
CID střední (zvyšuje se stupeň fragmentace)



CID High (vysoký stupeň fragmentace)

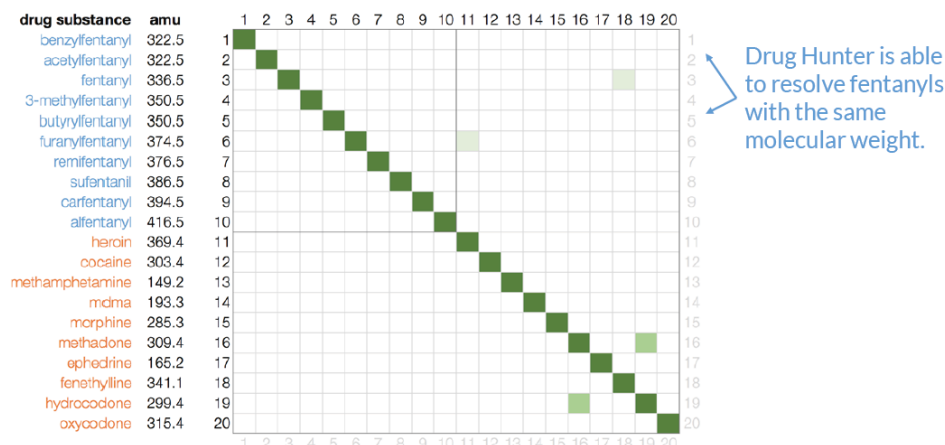
Jak se CID projeví například při analýze dvou různých derivátů fentanylu s velmi blízkou hmotou nám ukazuje následující obrázek. Je jasně patrné, že s využitím CID můžeme velmi spolehlivě odlišit obě tyto látky.

MX908 Drug Hunter: Isobar Identification

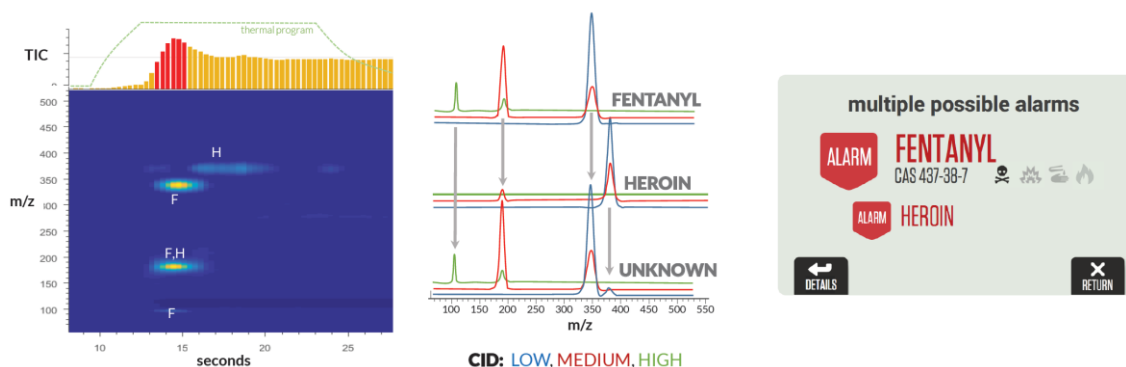


Chained probability: Joint probability of M+H, M+H yielding daughter ion 1, daughter 2, ... daughter ion *N*

Obrázek níže demonstruje schopnosti spolehlivě od sebe odlišit různé deriváty fentanylu s blízkou hmotností (isobary) a některé další látky. Zelená políčka na uhlopříčce znamenají správnou identifikaci (výsledek odpovídá testované látce), naopak políčka mimo uhlopříčku znamenají, že daná látka neposkytuje pozitivní výsledek na jinou testovanou látku.

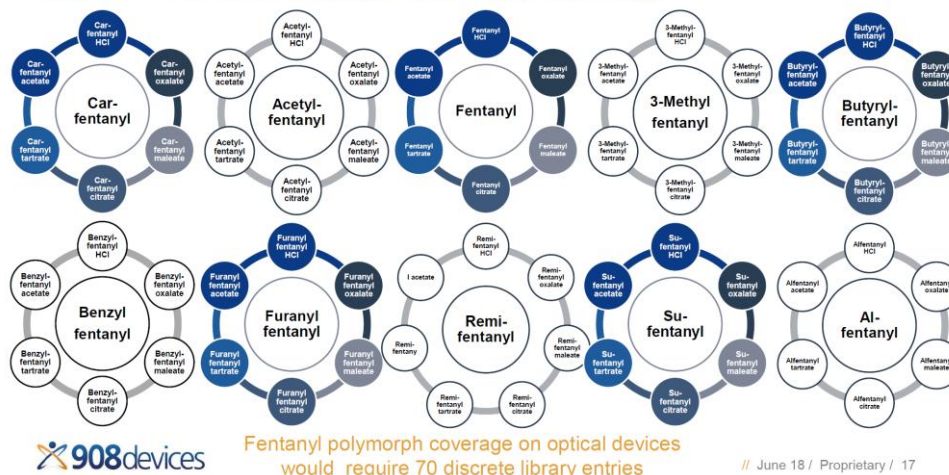


Ve spojení s termodesorpcí (vzorek je během cca. 12 s postupně zahříván na teplotu 200 °C) je pak možné analyzovat současně různé látky, jak ukazuje následující obrázek. Ve 2D grafu nalevo vidíme, jak se postupně vypařují látky ze sčervového terče, vpravo pak vidíme spektrum fentanylu, heroínu a neznámého vzorku (směs heroínu a fentanylu).



V případě identifikace derivátů fentanylu pomocí metod vibrační spektroskopie (Raman, FT-IR) je problémem to, že se tyto látky vyskytují v různých solích. Každá sůl pak poskytuje odlišná spektra. Na obrázku níže je ukázka pro deset derivátů fentanylu, z obrázku je patrné, že pro spektrální knihovnu budeme potřebovat změřit 70 spekter, pokud chceme získat robustní a spolehlivou identifikaci!

MX908 – Broad Fentanyl Salt-form Coverage



V případě použití hmotnostní spektrometrie tento problém odpadá, všechny izomorfy poskytují shodné spektrum a situace je tím pádem podstatně snadnější, to se nyní ukazuje jako další výhoda použití této techniky. Hlavní předností ale zůstává vysoká citlivost, **k spolehlivé identifikaci stačí desítky až stovky nanogramů látky**, můžeme tak detekovat a identifikovat neviditelné stopy těchto látek. To nám pomáhá například s varováním na přítomnost vysoce toxických drog v zásilkách, případně v drogových laboratořích, a tím včas varovat zasahující pracovníky na přítomnost těchto nebezpečných látek.

V příštím čísle pro Vás připravujeme nové informace z oblasti detekce plynů a využití XRF spektrometrie v oblasti bezpečnostních technologií. V případě, že Vás cokoliv zaujalo a chcete získat více informací nebo zajistit demonstraci kteréhokoliv z výše uvedených přístrojů, prosím kontaktujte nás.

Váš tým firmy RMI, s.r.o. – **jsme tu pro Vás** 😊.

RMI, s.r.o.

Horka 221, 533 41 Lázně Bohdaneč

Tel.: 466 921 885, 466 921 404

e-mail: sale@rmi.cz

web: www.rmi.cz