SafetyNews No. 24:

Dnešní SafetyNews Vám přinášejí **řadu velmi zajímavých novinek**:

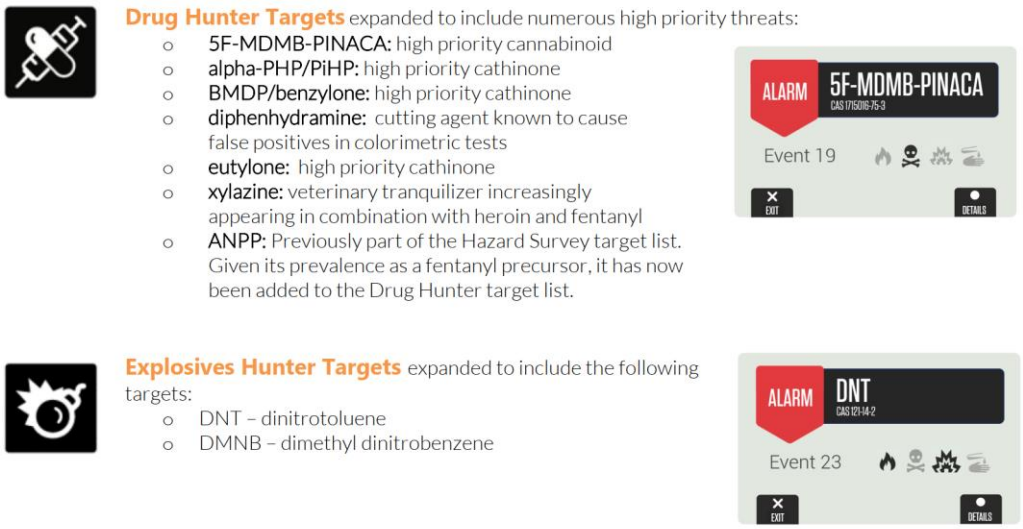
- Naše zkušenosti s používáním nového a skutečně „revolučního“ ručního Ramanova spektrometru **Pendar X-10**
- Novinka firmy Thermo pro spektrometry **Gemini** – **LowDoseID**: Speciální software zaměřený na analýzu složitých směsí (zejména pouličních drog) a systém pro měření nízkých koncentrací využívající techniku SERS.
- Nový „back scatter“ detektor (mobilní rentgenový zobrazovač) **PX1** od firmy **VIDERAY**

Rádi bychom Vás také upozornili na webinář, který se uskuteční v příštím týdnu (15. a 17. září) a bude zaměřen na ultrastopovou detekci výbušnin a novou generaci přístroje Fido X4 od firmy FLIR (přihlášení zde).

Již tradičně, na úvod přinášíme shrnutí informací o nových upgradech softwaru pro námi dodávané přístroje:

- Je k dispozici nový upgrade firmware a spektrální knihovny pro ruční **FT-IR spektrometry TruDefender**. K dispozici je nyní verze 1.6, rozšíření knihovny obsahuje také 76 nových spekter Fentanylu a jeho analogů. V softwaru je nová možnost administrace (možnost logovat se jako Administrátor a Operátor). V prohledávání knihoven je nová možnost prohledávat látky také podle CAS kódu.
- Je k dispozici upgrade knihovny pro Ramanovy spektrometry **FirstDefender RM a RMX**. Knihovna nyní obsahuje 12 711 látek a je prioritně zaměřena na nebezpečné látky. Byly přidány zejména spektra nových opioidů, syntetických cannabinoidů, syntetických cathinonů a phenethylaminů. Díky úzké spolupráci firmy Thermo s vládou USA obsahuje knihovna spektrometrů FD RM a RMX nejkomplexnější knihovnu fentanylů a jejich analogů (spektra různých forem/solí, to je důležité pro správnou identifikaci těchto vysoce toxických látek pomocí metod molekulární vibrační spektrometrie).
- Je k dispozici další a tentokrát **rozsáhlý upgrade** pro **mobilní hmotnostní spektrometry MX908** (nyní verze 2.2). Nový software přináší řadu dalších zlepšení v detekčních

algoritmech, dále se zrychlilo čištění přístroje v termodesorpčním módu, rozšířily se interní diagnostické testy, uživatel může nyní také snadno exportovat výsledky diagnostiky. V režimu analýzy bojových chemických látek (CW Hunter) došlo k vylepšení algoritmu procesu analýzy nízkotěkavých látek měřených v režimu termální desorpce – **dále se tím vylepšily detekční schopnosti při analýze látek typu Novitchok a VX** (pokud potřebujete více informací, prosím kontaktujte nás). V režimu analýzy drog (Drug Hunter) a při analýze výbušnin (Explosives Hunter) byly přidány nové látky – viz. obrázek níže.



Zkušenosti z používání a testování revolučního ručního Ramanova spektrometru Pendar X-10

V čísle Safety News No. 21 jsme Vás poprvé informovali o uvedení na trh nového ručního Ramanova spektrometru Pendar X-10 (**ke stažení zde**). Po mnoha letech se jednalo o zásadní inovaci v oboru mobilních Ramanových spektrometrů. Poprvé se na trh dostal skutečně plně funkční Stand OFF Ramanův spektrometr, schopný měřit za různých světelných podmínek ze vzdálenosti až 80 cm, a to i přes několik transparentních obalů. Spektrometr navíc sliboval vyřešení i dalších dvou zásadních problémů mobilních Ramanových spektrometrů:

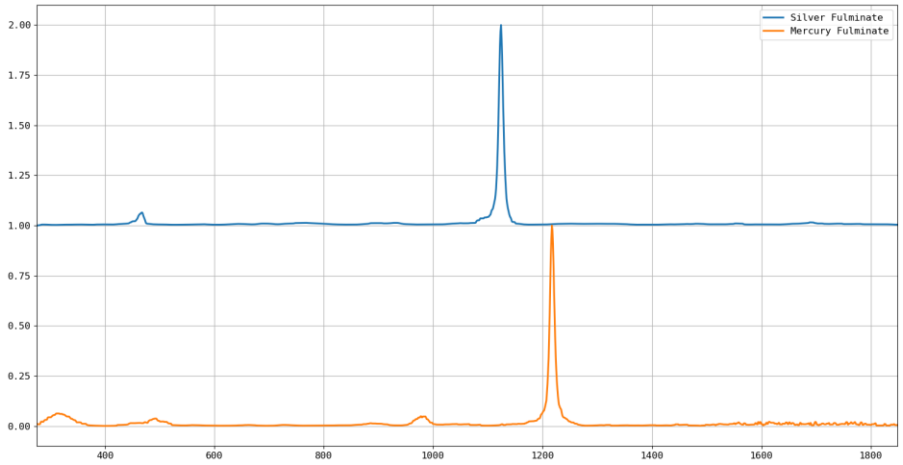
- schopnost spolehlivě identifikovat i vzorky s extrémně vysokou vlastní fluorescencí
- schopnost BEZPEČNĚ měřit i termicky nestabilní vzorky, včetně černých vzorků a extrémně citlivých výbušnin a třaskavin

Za vývojem tohoto revolučního přístroje stála velká část původního vývojového týmu, která před mnoha lety zkonstruovala první komerčně úspěšný ruční Ramanův spektrometr pro detekci nebezpečných látek – přístroj Ahura FirstDefender. Naše firma díky dlouhodobé spolupráci s vývojovým týmem výrobce dostala k dispozici na testování jeden z prvních vyrobených kusů tohoto přístroje (první přístroj mimo území USA) a následně také finální výrobek, který začal být dodáván zákazníkům v USA. Ve spolupráci s kolegy z Německa jsme se tak podíleli na testování této technologie a zároveň jsme mohli sledovat rychlý pokrok ve vývoji firmware a tím i detekčních schopností této technologie. Finální verze přístroje vykazuje skutečně ojedinělé možnosti analýzy a představuje tak zásadní pokrok v oblasti ručních Ramanových spektrometrů používaných při identifikaci nebezpečných látek. Připravujeme pro Vás několik souhrnných aplikačních listů, níže přinášíme stručné shrnutí našich zkušeností.

1) Vzdálená (Stand OFF) analýza: Spektrometr je skutečně schopen měřit za různých světelných podmínek ze vzdálenosti od 30 do 60 cm, a to i přes několik různých transparentních nebo semitransparentních obalů. Je možné například měřit vzorky umístěné v různých obalech (sklo, plasty), které jsou ještě umístěny v dalším plastovém přepravním kontejneru. Měření přes všechny obaly ze vzdálenosti 40 cm umožnuje bezproblémovou identifikaci prekurzorů drog nebo výbušnin. Za optimálních podmínek je možné měřit až ze vzdálenosti 80 cm. Spektrometr používá unikátní technické řešení, které s vysokou účinností eliminuje okolní záření, a to v reálném čase v průběhu analýzy. Spektrometr je tak „imunní“ i proti změnám okolních světelných podmínek v průběhu měření!
   Je možné měřit jak v „ručním“ režimu (obsluha drží spektrometr v ruce a zamíří fokus na povrch vzorku) nebo je možné pro měření použít stativ (běžný lehký stativ pro kamery). Pak je možné se precizně zaměřit na povrch vzorku a analyzovat i velmi malé vzorky (spektrometr má motorizovaný fokus s krokem 0,1 mm). Schopnost Stand OFF analýzy je

velmi důležitá v případě, kdy je nutné eliminovat manipulaci se vzorkem. Tedy například při pyrotechnických aplikacích (EOD), nebo při analýze ilegálních laboratoří a drogových varen, kde hrozí riziko výskytu výbušnin a třaskavin citlivých na manipulaci. Při použití vhodného stativu je možné velmi rychle provézt analýzu různých materiálů umístěných například na stole bez nutnosti manipulace nebo vzorkování.
Další výhodou Stand OFF měření je možnost měření materiálů v sudech a jiných obalech přes plnící otvor.

2) Schopnost měřit i termicky vysoce citlivé materiály: Toto je zásadní problém současné generace Ramanových spektrometrů. Běžné spektrometry s laserem 785 nm jsou schopné inicializovat termicky citlivé tmavé vzorky (střelné prachy, kontaminovanou nitrocelulózu) nebo extrémně citlivé látky jako jsou azidy nebo fulmináty. Spektrometry s laserem 1064 cm jsou na tom ještě podstatně hůře. Běžně „pálí“ dírky do obalů nebo i světlých vzorků (tablet drog, obálek…) a jsou schopné inicializovat široké spektrum energetických materiálů. Výrobce spektrometru Pendar X-10 deklaroval vysokou odolnost proti inicializaci vzorku. Testovali jsme proto různé materiály a to tak, že byly vždy měřeny po dobu 5 minut. Běžné doby analýzy u spektrometru Pendar X-10 se přitom pohybují v jednotkách až desítkách sekund (viz dále), v extrémních situacích nemá smysl prodlužovat dobu analýzy na více jak 3 minuty. Spektrometr Pendar X-10 nebyl schopen inicializovat žádný z testovaných materiálů ani při době měření 5 minut. Testovány byly následující materiály:
    - Různé typy střelných prachů, kontaminovaná nitrocelulóza (běžně iniciovány spektrometry s 785 nm po několika sekundách a prakticky okamžitě při použití spektrometru s laserem 1064 nm)
    - Fulminát rtuťnatý – stabilní i po expozici v délce 5 minut. Ostatní Ramanovy spektrometry iniciují prakticky okamžitě i při použití nízké energie laseru.

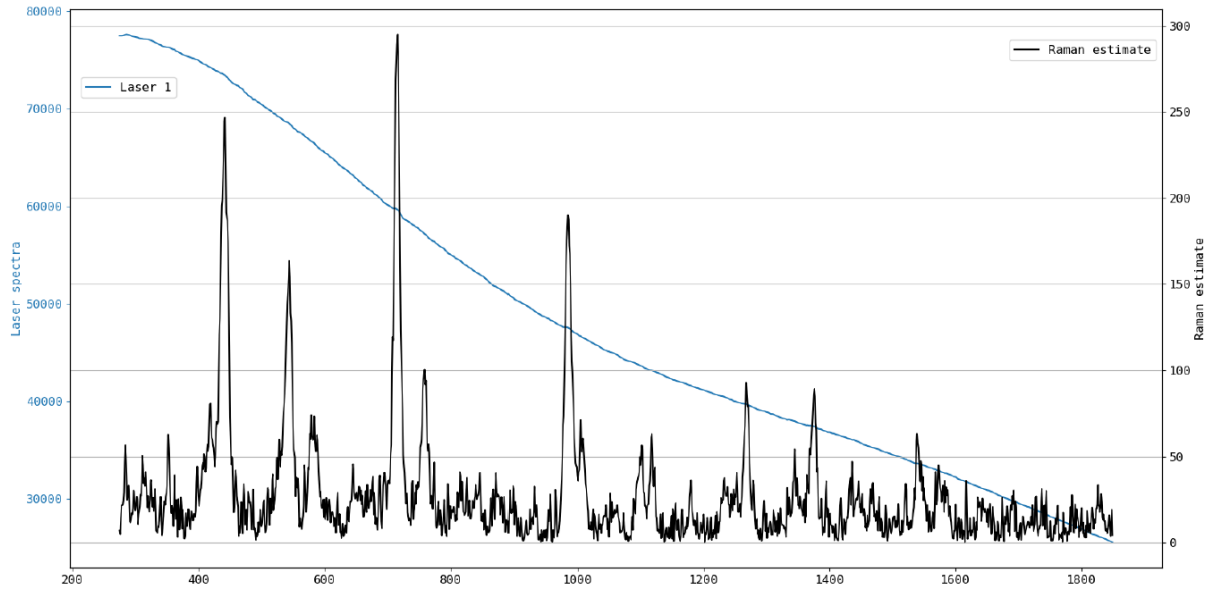


- Nové energetické materiály na bázi komplexů mědi - stabilní i po expozici v délce 5 minut. Není možné měřit běžnými Ramanovými spektrometry (nestabilní).

3) Odolnost proti porušení obalu: Ramanovy spektrometry s laserem 1064 nm vykazují často problém s tím, že během měření dojde k porušení plastového obalu a tím k úniku/odpaření vzorku do okolí. To je problém, pokud se jedná o vysoce toxickou látku (například Carfentanyl), kdy se smrtelné dávky pohybují v jednotkách až desítkách mikrogramů. Během testů jsme se tedy zaměřili i na tuto problematiku a s využitím stativu a přesného motorizovaného fokusu jsme zaměřovali fokus na povrch plastových obalů. K porušení obalu nedošlo v žádném z případů, a to i při použití extrémně tenkého plastového sáčku.

4) Schopnost měřit vysoce fluoreskující vzorky: Vysoká vlastní fluorescence byl doposud velký problém pro všechny konvenční ruční Ramanovy spektrometry. Fluorescence překrývá Ramanovo spektrum a v řadě případů znemožňuje měření, a to jak na spektrometrech s laserem 785 nm, 830 nm tak i na spektrometrech s laserem 1064 nm. V oblasti výbušnin se typicky jedná o Semtex 10 a zejména některé plastické trhaviny ruské produkce značené vysoce fluoreskujícími látkami. V oblasti narkotik vykazují extrémní fluorescenci některé prekurzory, heroiny, fentanyly nebo například tablety extáze (MDMA) do kterých bývají někdy záměrně přidávány vysoce fluoreskující látky. Spektrometr Pendar X-10 používá speciální technologii, která dokáže potlačit i velmi vysokou fluorescenci vzorku. Na obrázku níže je ukázka spektra prekurzoru pro výrobu narkotik změřeného na konvenčním spektrometru s budícím laserem 830 nm a spektrum získané spektrometrem Pendar X-10. Srovnávací spektrum na spektrometru s laserem 1064 nm nebylo možné získat, protože vlivem vysoké fluorescence docházelo k saturaci

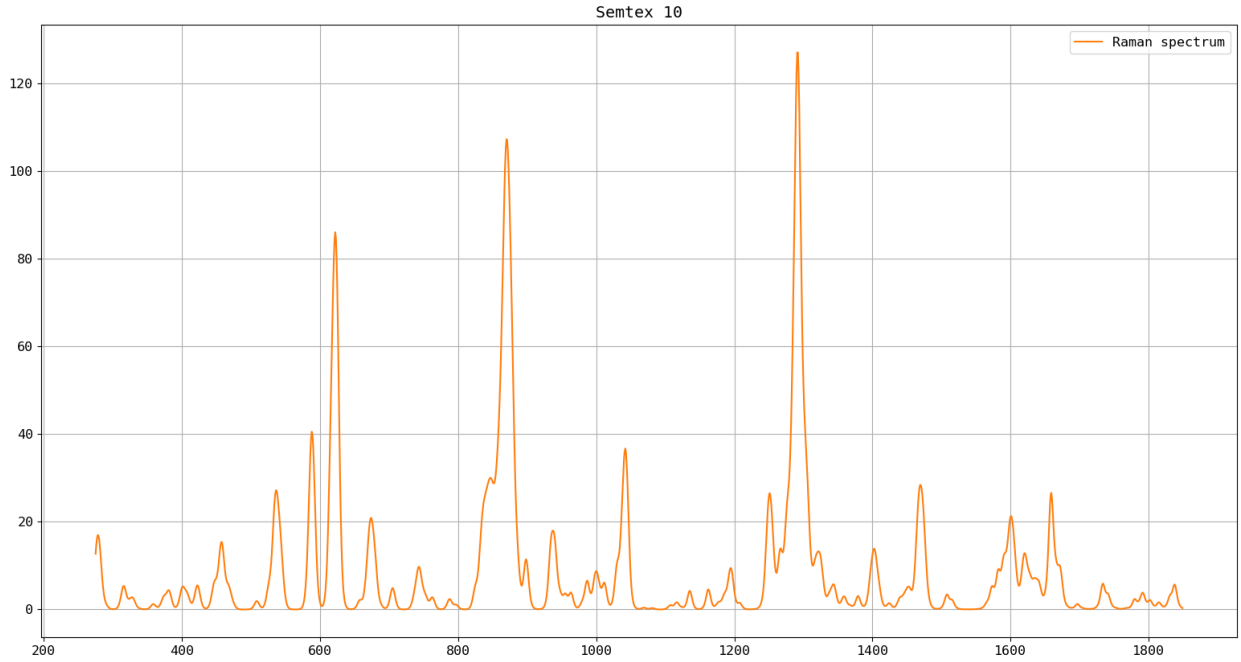
InGaAs detektoru spektrometru. Identifikace této látky byla možná na spektrometru Pendar X-10 během 20 s (doba měření).



2-Chloro-4-Methylpyrimidine (prekurzor pro výrobu narkotik – reálný vzorek)

Dále byla testována sada několika reálných vzorků tablet MDMA. V některých případech se jednalo o vysoce fluoreskující vzorky, které nebylo možné měřit na spektrometrech s budícím laserem 785 nm (vysoká fluorescence vyžadující dlouhý čas analýzy), ani na spektrometrech s laserem 1064 nm (vysoká fluorescence saturuje detektor nebo je spektrum zatíženo řadou artefaktů z matematické filtrace dat a je identifikována nesprávná látka). V případě laseru 1064 nm u některých vzorků navíc docházelo k teplotní degradaci v místě měření, což opět znemožňuje měření. Spektrometr Pendar X-10 byl schopen provést identifikaci během 10 – 20 s, a to i u vzorků s extrémní fluorescencí.

Spektrometr Pendar X-10 jsme použili také na vzorky černého Semtexu 10. Protože se jedná o černé vzorky je doba analýzy delší. V případě „čerstvého“ vzorku bylo možné identifikovat i malá množství ulpělá na povrchu obalového materiálu (doba analýzy 60 – 90 s) – výsledkem byla identifikace Semtex 10. V případě velmi starého a částečně degradovaného vzorku bylo potřeba již 120 až 180 sekund s tím, že výsledek byl buď PETN (hlavní komponenta Semtex 10) nebo Semtex 10 – v závislosti na měřeném místě vzorku.



Problematice měření vysoce fluoreskujících vzorků pomocí Ramanovy spektrometrie se budeme nadále věnovat a chtěli bychom na toto téma připravit samostatný aplikační list.

Závěr z našich testování spektrometru Pendar X-10. Jedná se skutečně o průlomovou technologii, která jednoznačně přináší výrazný pokrok v oblasti analýzy/identifikace nebezpečných látek. Významně zvyšuje bezpečnost použití a ochranu operátora a jeho okolí a zároveň rozšiřuje detekční schopnosti Ramanovy spektrometrie i na černé a vysocefluoreskující vzorky a na termicky nestabilní vzorky.

Základní technické informace o spektrometrech Pendar X-10 najdete zde:
http://www.rmi.cz/pendar-x10

Novinka firmy Thermo pro spektrometry Gemini – LowDoseID

Výroba, distribuce a užívání drog je celosvětovým problémem. Drogová scéna prošla v posledních letech zásadní změnou, kterou představuje přechod od tradičních drog k novým syntetickým drogám, jejichž počet se neustále zvyšuje. S tímto trendem také neustále vzrůstají nároky na detekční techniku, která by byla schopná spolehlivě identifikovat tyto látky, a to i v případě konečné ("pouliční") formy. Zde se často jedná o složitější směsi, které obsahují řadu maskujících činidel nebo vysoce fluoreskujících látek, což ztěžuje vlastní identifikaci. Současně se na trh začaly v masivní míře dostávat i nové vysoce účinné látky (Fentanyl a zejména některé jeho analogy), které se v konečné formě drog nachází ve vysokém zředění. Tento trend nastal před více lety v USA a nyní se šíří do světa. Výraznou akceleraci tohoto jevu také způsobila koronavirová krize, kdy se tyto látky stávají snadněji dostupnou alternativou k tradičním drogám.

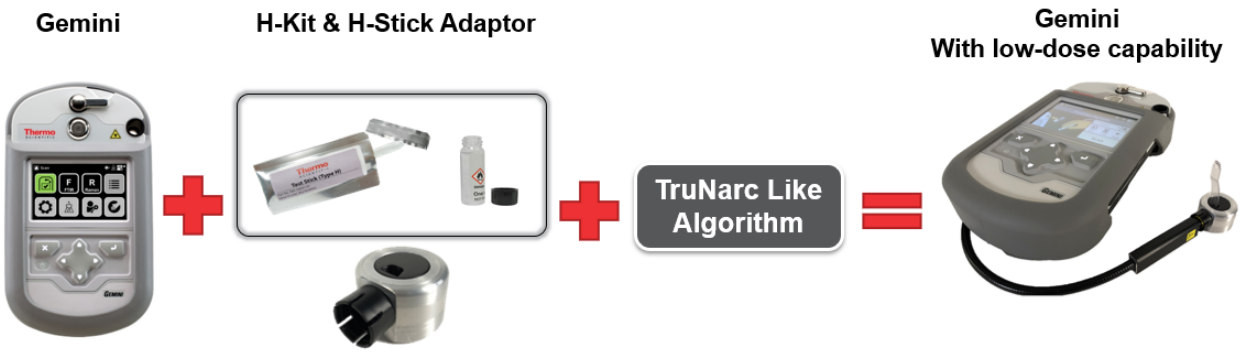
Při terénní analýze drog se zatím nejvíce prosadily metody molekulové vibrační spektrometrie (FT-IR a Ramanova spektrometrie) a firma Thermo Scientific zde hrála zásadní roli. Nejprve uvedením specializovaného ručního Ramanova spektrometru TruNarc (používá speciální algoritmy optimalizované pro analýzu pouliční kvality drog) a následně spektrometru Gemini, který je jediným ručním přístrojem na světě, který v sobě kombinuje infračervenou spektroskopii s Fourierovou transformací (FT-IR) a Ramanovu spektroskopii v jedné jednotce. Jedná se o komplementární techniky a kombinace obou metod výrazně zlepšuje schopnost uživatele identifikovat neznámé látky v terénu, zejména pak v případě drog. Oba přístroje se staly "standardem" v této oblasti.

FT-IR a Ramanova spektroskopie jsou excelentní analytické techniky pro identifikaci drog v čisté formě a v relativně koncentrovaných směsích. V posledních letech vzrůstá výskyt drog, kde se účinná látka nachází ve vyšším stupni zředění (0,5 – 10 hmotnostních %), jako je například fentanyl a jeho analogy v práškových směsích a pilulkách. Samostatnou problematikou je pak analýza léčiv zneužívaných na drogové scéně, kdy se opět jedná o tablety s vysokým stupněm zředění účinné

látky. V těchto případech klasická analýza na FT-IR a Ramanových spektrometrech selhává, nebo je velmi náročná na kvalitu změřených dat a jejich následné zpracování. To do značné míry limitovalo využití těchto technik v terénu na tyto typy vzorků.

Prvním řešením, se kterým přišla firma Thermo již před více lety, byly specializované algoritmy pro zpracování dat a využívání SERS substrátů u spektrometru TruNarc. Nyní firma Thermo přenesla získané zkušenosti do novinky LowDoseID™ pro přístroj Gemini. Jedná se o dvě nová vylepšení:

1. Možnost použití H-Kitu fungujícím na principu SERS (surface enhanced Raman spectroscopy – povrchově zesílená Ramanova spektroskopie) také na spektrometrech Gemini.
2. Přidání druhého algoritmu pro identifikaci Ramanových spekter, pojmenovaného Screener.



H-Kit (fungující na principu SERS)

SERS je analytická technika, při které jsou molekuly látky nejprve adsorbovány na povrch kovových nanostruktur, případně na modifikované kovové povrchy. Tyto adsorbované molekuly pak mohou vykazovat až několika řádové zesílení Ramanova rozptylu, současně dochází k potlačení fluorescence vzorku. To pak umožňuje detekci nízkých koncentrací drog ve směsích a tabletách, případně analýzu vysoce fluoreskujících vzorků.

Firma Thermo již řadu let vyrábí vlastní cenově dostupné SERS substráty pro spektrometry TruNarc, nyní je možné jejich používání i na spektrometrech Gemini. Dodávají se jako tzv. H-Kit, jehož součástí je plastová testovací tyčinka s vlastním SERS substrátem na jednom konci a "mističkou" pro odběr vzorku na druhém konci. Druhou částí je pak vialka s rozpouštědlem (buď metanol nebo etanol). Uživatel nabere malé množství zkoumané látky (běžně 2 až 4 mg) a umístí ho do vialky s rozpouštědlem. Po rozpuštění vzorku a usazení nerozpuštěného pevného materiálu na dno vialky je SERS substrát ponořen do rozpouštědla tak, aby se celý namočil. SERS substrát je poté vyjmut a nechá se zcela uschnout. Následně se suchý SERS substrát vloží do nástavce spektrometru Gemini a spustí se automatická analýza.

Algoritmus Screener

Další součástí LowDoseID je druhý algoritmus pro analýzy Ramanových spekter nazývaný Screener. Tento algoritmus je velmi podobný algoritmu, který se používá u spektrometrů TruNarc™ firmy Thermo Scientific™. Tento algoritmus byl původně vyvinut pro identifikaci drog v komplikovaných směsích, typických pro pouliční kvalitu drog. Zjednodušeně řečeno, oproti standardnímu ID algoritmu, který odpovídá na otázku „Jaké neznámé látky jsou přítomny v mém vzorku?“ algoritmus Screener odpovídá na otázku „Je daná látka přítomna v mém vzorku?“. Algoritmus Screener může analyzovat jak normální Ramanova spektra, tak spektra získaná pomocí SERS H-Kitu.

Algoritmus Screener používá speciální konfigurační soubor obsahující látky, které chce uživatel prověřovat. Přístroj je dodáván s předdefinovaným souborem, který obsahuje více jak 700 běžných drog, prekurzorů drog a ředících látek a každá látka má přiřazenu jednu ze tří možných klasifikací: **Alarm** (Poplach), **Warning** (Varování) nebo **Clear** (Čistý). Uživatel si může vytvářet své vlastní konfigurační soubory modifikací tohoto výchozího souboru. Látky mohou být přesouvány mezi klasifikacemi, přidány do souboru z výchozí Ramanské knihovny přístroje obsahující přes 12700 položek nebo z uživatelem vytvořené knihovny nebo naopak vymazány ze souboru.

Závěr: LowDoseID dále rozšiřuje schopnosti unikátního spektrometru Gemini, uživatel tak kromě měření na výkonném FT-IR s diamantovým ATR a automatizovaným motorizovaným přítlakem může využívat všechny výhody Ramanovy spektrometrie, včetně pokročilých algoritmů (běžná analýza směsí, tagging a nyní i Screener) a možnosti využití SERS substrátů včetně možnosti vytváření vlastních SERS knihoven pro automatickou identifikaci s optimalizovanými algoritmy pro SERS identifikaci. LowDoseID najde uplatnění nejen při analýze drog, je obecně použitelný i na ostatní aplikace.

Více o spektrometru Gemini, včetně brožury pro LowDoseID a aplikačního listu pro LowDoseID naleznete zde: http://www.rmi.cz/gemini-novinka

Nový „back scatter“ detektor (mobilní rentgenový zobrazovač) PX1 od firmy VIDERAY

NEW Nová generace detektoru zpětného rozptylu (**back scatter detektor**) je novinkou v našem sortimentu mobilních přístrojů. Přístroj **PX1** byl vyvinutý americkou firmou **VIDERAY** v úzké spolupráci s MIT univerzitou v Bostonu. Jedná se momentálně o nejnovější back scatter detektor na trhu (tzv. 3. generace) a ve srovnání se současnou generací back scatter detektorů přináší řadu inovací.

V těle přístroje je integrovaný rentgenový zdroj, který vysílá rentgenové záření směrem ke skenovanému objektu. Zpětně odražené záření od skenovaného předmětu je pak zachyceno detektorem, softwarově zpracováno na integrovaném počítači a zobrazeno na LCD displeji skeneru. Zobrazení vnitřní struktury objektu se děje online, to znamená, že obsluha vidí okamžitý obraz vnitřní struktury předmětu během jeho skenování.

Přístroj je určen především pro detekci narkotik, výbušnin, zbraní a kontrabandu (pašování peněz, léčiv...) v zásilkách, zavazadlech, vozidlech, letadlech, odpadových nádobách a podobně. Je použitelný na vyhledávání skrytých vodičů a elektronických struktur ve zdech, skrytých dutin

s kontrabandem atd. Díky použití nové technologie má detektor penetrační hloubku až **6 mm oceli** (schopnost zobrazit objekt až za 6 mm oceli). **Více podrobností o tomto produkte naleznete zde:**

http://www.rmi.cz/mobilni-inspekcni-rentgen

Zaujalo Vás něco z dnešních novinek, potřebujete Více informací, nebo by jste v našich novinkách rádi našli nějaké další informace? Prosím neváhejte a kontaktujte nás, rádi Vám poskytneme další informace, budeme také vděčni za jakoukoliv zpětnou vazbu, která nám umožní vylepšení těchto **Safety*News***. Všechna předchozí čísla naleznete také na našich stránkách v sekci Odborná literatura: http://www.rmi.cz/safety-news

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