



SafetyNews No. 35:

Dnešní **SafetyNews** jsou zaměřeny na analýzu plynné fáze a přináší řadu zajímavých informací z oblasti **identifikace plynů a par** s využitím plynové FT-IR a z oblasti **kontinuálního monitorování vysoce toxických par/plynů a aerosolů** při zabezpečení kritických akcí, ochraně budov a dalších aplikacích.

V části věnované **plynové FT-IR** naleznete informace o dynamické adaptivní korekci pozadí (proč je důležitá, jak je možné zautomatizovat analýzu i nízkých koncentrací atd.) a řadu praktických informací o rychlé a spolehlivé kvantitativní analýze při použití FT-IR a PID detektorů a o výhodách, které přináší současné použití PID a kontinuálního plynového FT-IR detektoru při řešení reálných situací. Naleznete zde také odkaz na zajímavý webinář věnované praktickým otázkám využití plynové FT-IR a další.

V části věnované **kontinuálnímu monitorování vysoce toxických plynů a aerosolů** si pak ukážeme, jak je možné s novinkou **BEACON** proměnit ruční HPMS detektor MX908 v kontinuální monitor sledující současně plynnou fázi i aerosoly v ovzduší a jak je možné snadno zapojit více jednotek do sítě, která pak může zabezpečit například stadion nebo větší plochu při konání velkých mítinků nebo sportovních akcí.

V obou částech najdete také odkazy na **zajímavé webináře**, doporučujeme jejich shlédnutí.

V úvodu bychom Vás rádi upozornili na nově dostupný upgrade pro přístroje Pendar X10 a MX908 a stručně Vám představili **dvě novinky z oblasti hardware**.

Uživatelé Stand OFF Ramanových spektrometrů **Pendar X10** si mohou nainstalovat (pokud tak již neučinili) nový software a knihovnu. Nová knihovna obsahuje již více jak 7150 látek s hlavním zaměřením na nebezpečné látky, drogy, výbušniny a jejich prekurzory a také na další významné skupiny (bílé prášky, průmyslově používané

látky, farmaceutické chemikálie a další). V oblasti výbušnin, drog a jejich prekurzorů se momentálně jedná o nejkomplexnější knihovnu dostupnou pro Ramanovy spektrometry. Všechna spektra v knihovnách jsou originální spektra, změřená dvouvlnovou diferenční Ramanovou spektrometrií na přístrojích Pendar X10. To dále významně zvyšuje identifikační výkon knihovny při analýze složitých směsí nebo analýze obtížných vzorků (například schopnost identifikovat 1% m/m látky Testosteron v rostlinném oleji vykazujícím vysokou vlastní fluorescenci).

Pro uživatele spektrometru [MX908](#) máme nový upgrade (verze 3.4.2). Ten přináší některá vylepšení oproti verzi 3.4.1. Pro uživatele, kteří si doposud neprovedli upgrade na verzi 3.4.1 doporučujeme rovnou udělat upgrade na verzi 3.4.2 (není nutné nejprve upgradovat na 3.4.1). Ihned získáte všechny novinky, které přinesla verze 3.4.1 (vylepšené algoritmy řízení pumpy během čištění a možnost vzdáleného ovládání jednotky, nové látky v knihově: 5F-MDMB-PICA - syntetický cannabinoid, p-fluorofentanyl – ananlog fentanylu, N,N-dimethylpentylone – syntetický cathinon a primární výbušnina Mercury Fulminate). **Pro získání upgrade nás prosím kontaktujte.**

Novinky v oblasti hardware



K dispozici je nový nástavec, který umožňuje „zkonvertovat“ Stand OFF Ramanův spektrometr Pendar X10 na malou mobilní laboratoř pro analýzu různých typů vzorků (vialky, tablety, sáčky, lahve, ...) a to včetně analýzy velmi malých vzorků. Díky automatické fokusaci na vzorek a použití laseru třídy 3R (není nutné použití

ochranných brýlí) stačí položit vzorek na okénko nástavce a provede se automatická a velmi rychlá analýza. Tedy podobně jako u FT-IR spektrometrů s ATR, v tomto případě ale není nutný žádný tlak na vzorek. Je tedy možné bezpečně měřit i materiály citlivé na tlak. Samozřejmě zůstává zachována i jedna z hlavních předností spektrometru Pendar X10, bezpečné měření jak tmavých vzorků, tak jakýchkoliv typů energetických materiálů včetně primárních, jako jsou azidy nebo fulmináty. Je možné také měřit i vnitřní obsah u dvoustěnných vialek (vialka ve vialce), které se používají na extrémně toxické materiály. Spektrometr se sám zafokusuje na obsah vnitřní vialky a provede analýzu. Při spojení s PC (pomocí USB-C nebo bezdrátově pomocí WiFi) pak můžete využívat Windows software a používat přístroj Pendar X10 také jako výkonný nástroj pro terénní forenzní analýzu nebo jako laboratorní Ramanův spektrometr.



Druhá krátká informace o hardware novinkách se týká uvedení na trh nové generace cenově dostupných kapesních gama spektrometrů **identiFINDER R225.** R225 nahrazuje předchozí model R200 a představuje personální monitor radiace se schopností dohledávat zdroje radiace a okamžitě je také identifikovat. Identifikační schopnosti R225 jsou na stejné úrovni jako u „velkého“ identiFINDERu R425. Ten se stal celosvětově nejprodávanějším ručním gama spektrometrem, podobně jako v minulosti jeho předchůdce identiFINDER R400. Oproti R425 je samozřejmě nižší citlivost, používá se menší krystal). Citlivost je ale pořád na výrazně vyšší úrovni než u ostatních kapesních zařízení tohoto typu, protože je použit kubický krystal o velikosti 18x18x18 mm spojený s plošným SiPIM fotonásobičem. Kromě standardního materiálu krystalu CsI(Tl) **je k dispozici i verze s LaBr(Ce) detektorem** o stejné velikosti, který nabízí již spektrální rozlišení lepší jak 3,5% (FWHM při 662 keV). Poprvé se tak na trh dostává „kapesní“ zařízení s tímto rozlišením a současně vysokou citlivostí, navíc certifikované dle IP67 i MIL STD 810G (Salt Fog).

Více informací získáte zde: <https://www.flir.com/products/identifinder-r225/?vertical=radiation&segment=detection>



Krátké video zde: <https://youtu.be/oyMgSW4KBYQ>

Kontinuální analýza plynů s mobilním FT-IR spektrometrem XplorIR.

Od uvedení mobilního FT-IR spektrometru XplorIR pro okamžitou identifikaci par a plynů přímo v hot zóně jsme Vás informovali již v našich Safety News 32 (ke stažení zde: [Safety News 32](#)). Od té doby uplynul jeden rok a my jsme tak mohli nejen sledovat vývoj tohoto zařízení, ale vždy také u nás otestovat uváděné novinky. V průběhu letošního roku jsme tak zaznamenali dvě zásadní inovace. První bylo uvedení nové verze spektrometru s **12x** výkonnějším interním počítačem (a tím i masivním výpočetním výkonem pro náročné operace s daty). Ten umožnil prakticky okamžitou simultánní identifikaci všech 5500 látek v knihovně při bodovém měření. Druhou novinkou byla Dynamická adaptivní korekce atmosférického pozadí, která také vyžaduje masivní výpočetní výkon. Ta přenesla schopnost okamžité simultánní identifikace všech 5500 i do kontinuálního monitorování. Jedná se o novou algoritmickou technologii, která otevřela cestu ke zcela automatickému monitorování/identifikaci látek pomocí plynové FT-IR, a to i za situací, kde se pozadí spektra dynamicky mění v průběhu monitorování (tedy například při pohybu ručního analyzátoru v hot zóně). **Tato technologie podle nás přináší zásadní průlom v možnosti použití plynové FT-IR pro kontinuální monitorování v hot zóně běžnými pracovníky bez speciálních znalostí**, a proto se jí také v tomto čísle Safety News podrobněji věnujeme. **V zásadě došlo ke stejnému „průlomu“ jaký kdysi**

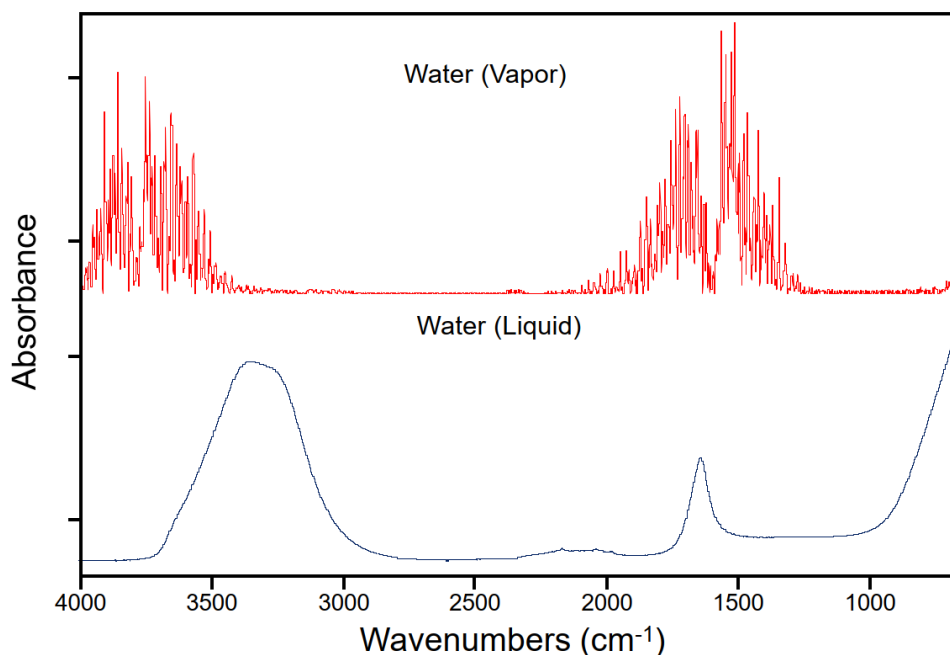
přinesli Ramanovy spektrometry Ahura First Defender do oblasti identifikace pevných a kapalných látek. Tedy jednoduché ovládání několika tlačítky, kdy na pozadí běží inteligentní algoritmy, které provedou spolehlivou identifikaci za operátora a tomu poskytují okamžité a jednoznačné výsledky.



Analýza plynné fáze s FT-IR spektrometry – vliv atmosféry na vlastní analýzu.

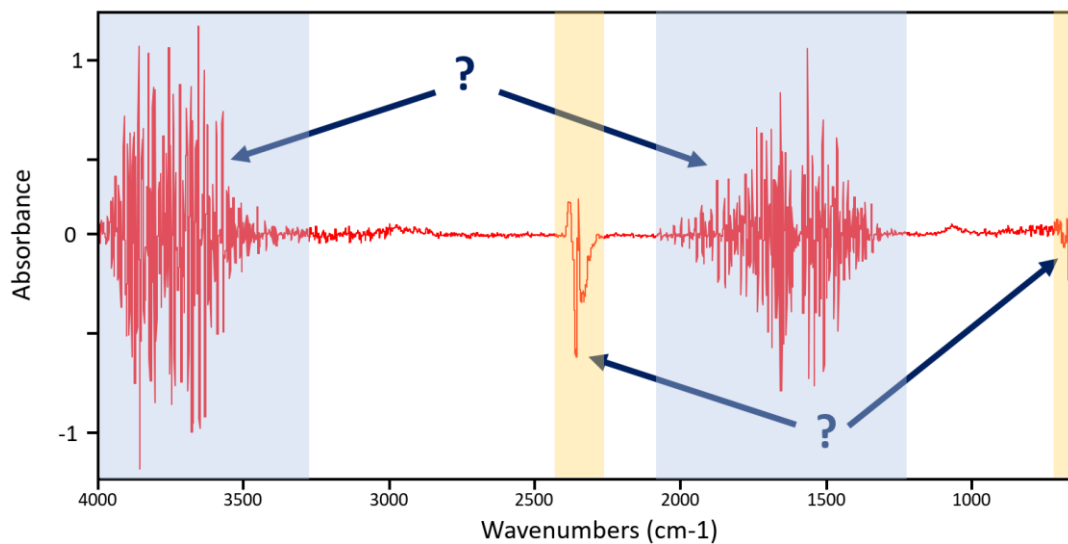
Infračervená spektrometrie je ideální technikou pro identifikaci látek v plynné fázi. Stejně jako v případě identifikace neznámých pevných nebo kapalných vzorků pomocí FT-IR spektrometrů (které je již léta rozšířeno v oblasti identifikace nebezpečných látek) jsou i v případě v případě plynů a par spektra specifická pro konkrétní látku (představují chemický otisk prstu dané látky). Spektra ale obsahují větší počet ostrých píků (rotačně vibrační struktura, která se může projevit pouze u plynných látek – molekuly mohou také rotovat a spektra tak často vykazují i jemnou rotační strukturu). Na obrázku níže je porovnání spektra vody v kapalně a plynné fázi. To na jedné straně přináší větší nároky na zpracování spektrálních dat a vlastní

spektrometry, ty by měli dosahovat spektrálního rozlišení alespoň 4 cm^{-1} . Na straně druhé je ale podstatně vyšší identifikační výkon, a to zejména v případě směsí, kdy je zcela běžné, že je možné spolehlivě identifikovat i šest složek ve spektru.

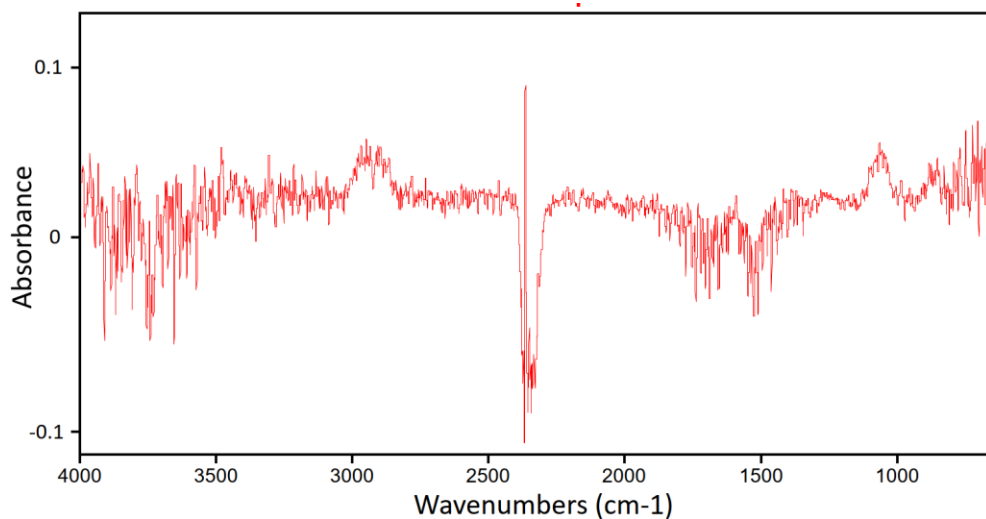


Vlastní analýza je dále komplikována tím, že běžné atmosférické složky vykazují velmi intenzivní infračervená spektra. Spektrum vody jsme si ukázali již výše, druhým velkým absorbérem je CO_2 , tedy dvě běžné složky vyskytující se ve vzduchu ve vysokých koncentracích. Při vlhkosti vzduchu 80% a teplotě 20°C je koncentrace vodní páry ve vzduchu cca 14 000 ppm, průměrná koncentrace CO_2 ve vzduchu je okolo 500 ppm. IDLH limity, důležité pro okamžité použití ochranných pomůcek, se přitom pro velkou část škodlivin pohybují na podstatně nižších úrovních koncentrace. Pro správnou identifikaci je tedy nutné provést kompenzaci/odečet pozadí, které je způsobeno atmosférickými složkami. Vzhledem k tomu, že koncentrace těchto složek se v čase mění a koncentrační odezva není lineární, je provedení této kompenzace náročné již u bodového měření a je zdrojem „zbytkového“ spektra v oblastech spektra vody a CO_2 , typicky vykazující negativní píky. Čím nižší koncentrace/absorbance potřebujeme měřit, tím větší tento problém je a v řadě případů je hlavní příčinou špatného identifikačního výkonu (schopnosti určit neznámou látku) pokud je přítomna v nízké koncentraci (viz dále). Na obrázku níže je typické „zbytkové“ (residuální) spektrum po odečtení atmosférických složek při použití konvekčního způsobu korekce a na dalším

spektrum vzorku nižší koncentrace neznáme látky v reálném vzorku vzduchu po konvenční korekci pozadí.



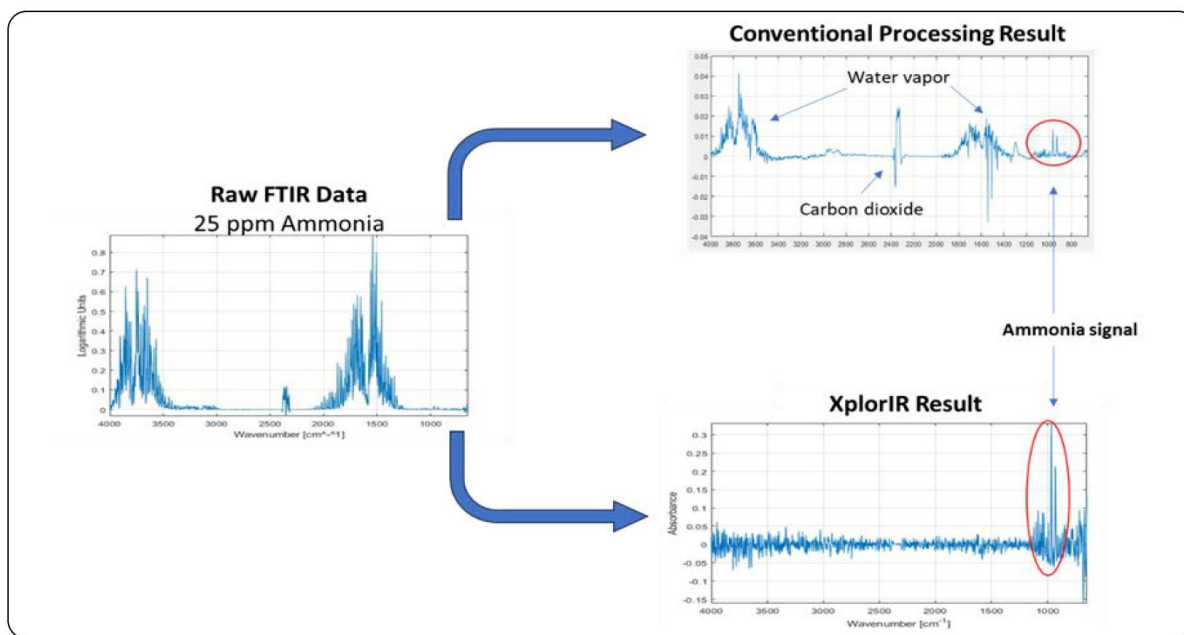
Zbytkové spektrum po konvekční kompenzaci atmosférických složek. Modré pásy odpovídají vodě, žluté pak CO₂, identifikace neznámých látek, které mají charakteristické pásy v této oblasti může být obtížná, zejména pokud se jedná o nízkou koncentraci.



Spektrum neznámého vzorku překryté reziduálním spektrem vody a CO₂ po konvekční korekci pozadí.

Dynamická adaptivní korekce atmosférického pozadí – spolehlivá identifikace za každých podmínek.

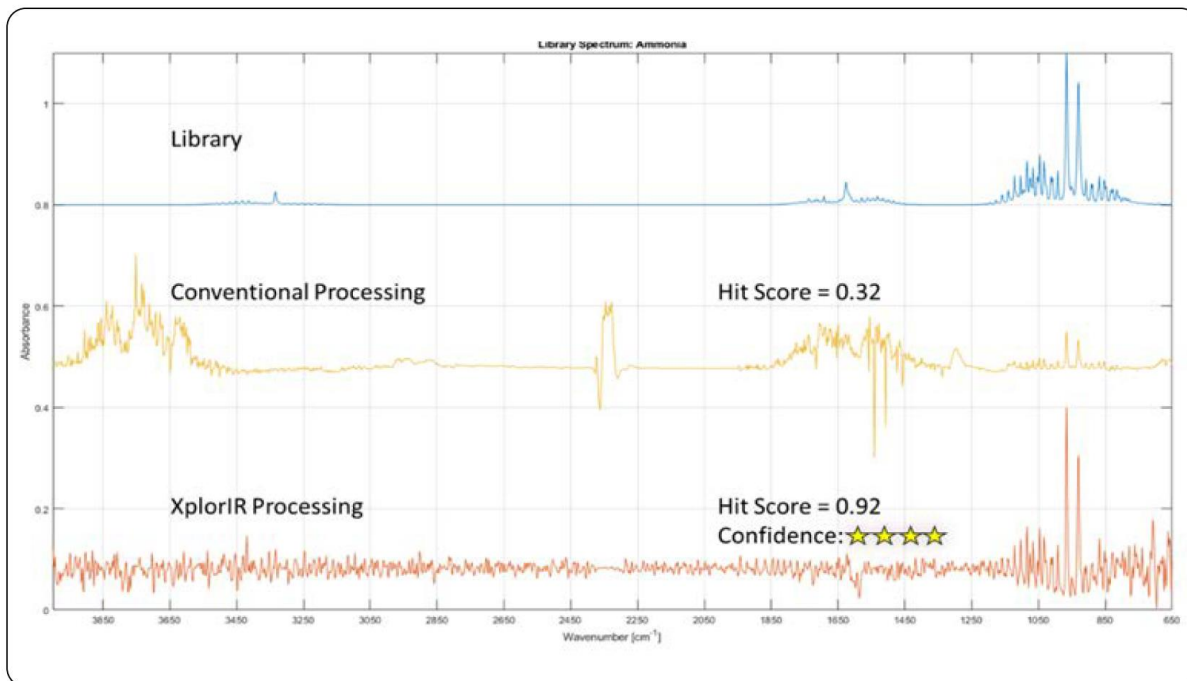
Dynamická adaptivní korekce používá moderní výpočty nelineárního dynamického modelování a je schopna velmi efektivně kompenzovat spektrum složek atmosféry. Spektrum po dynamické adaptivní korekci prakticky neobsahuje žádné residuální spektrum a je pak možné spolehlivě identifikovat i nízké koncentrace látek. Základní funkci si můžeme ukázat na následujících dvou obrázcích, které ukazují identifikaci 25 ppm amoniaku na spektrometru XplorIR. Na obrázku níže vidíme vlevo neupravené (RAW) FT-IR spektrum vzorku 25 ppm amoniaku ve vzduchu, vpravo nahoře spektrum po konvenční kompenzaci spektra pozadí (lineární 1:1 odečet) a vpravo dole spektrum po dynamické adaptivní korekci. V případě amoniaku je situace ještě poměrně příznivá, protože charakteristické spektrum amoniaku není významně překryto residuálním spektrem, identifikace 25 ppm amoniaku je tedy v manuálním režimu snadnou záležitostí.



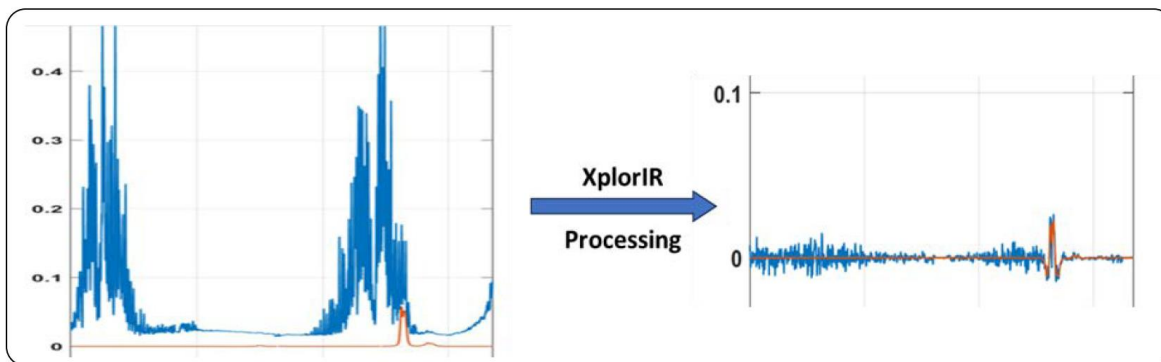
Infračervené absorpční spektrum 25 ppm amoniaku zpracovaného konvenčním a novým způsobem u spektrometru XplorIR ukazující výhodu adaptivní atmosférické korekce.

Residuální spektrum po konvenční úpravě spektra je ale zároveň příčinou nízké spolehlivosti automatické identifikace – získáváme velmi nízké hodnoty hit score, situace je zásadně odlišná od situace, kdy vyhodnocujeme spektra kapalných nebo

pevných látek. Doposud tedy bylo běžné, že potvrzení shody identifikace muselo být ověřeno operátorem se zkušenostmi ve zpracování spektrálních dat. Na obrázku níže je spektrum čistého amoniaku ze spektrální knihovny a spektrum reálného vzorku 25 ppm ve vzduchu po konvenčním zpracování. Hit score je pouze 0,32! Na dalším spektru je pak ten samý vzorek po dynamické adaptivní korekci, hit score je v tomto případě 0.92! Je tedy možná zcela automatická a spolehlivá identifikace látky.



Jak jsme uvedli výše, v případě amoniaku ještě nedochází k přímému překryvu s reziduálním spektrem. Podívejme se nyní ale i na méně příznivý případ SO₂, kdy je charakteristické spektrum kompletně překryto spektrem vody. Na obrázku níže je na levé straně spektrum 30 ppm SO₂ v reálném vzorku vzduchu, charakteristické spektrum je kompletně „pohlčeno“ residuálním spektrem. Na pravé straně je pak spektrum při použití dynamické adaptivní korekce, SO₂ je možné spolehlivě detekovat a identifikovat.



Spektrum 30 ppm SO₂ v reálném vzorku vzduchu po konvekční korekci atmosférických složek a při použití dynamické adaptivní atmosférické korekce.

Důležité je také se podívat na to, jaký je vliv dynamické adaptivní korekce na dosahované limity identifikace (jak nízké koncentrace jsme schopni identifikovat), a to zejména při různých atmosférických podmínkách. Za tímto účelem byla změřena spektra osmi vybraných látek za různých atmosférických podmínek (relativní vlhkost od 20 do 80%) v různých koncentračních rozmezích od 1 do 300 ppm. Pro každou látku byly koncentrace zvoleny tak, aby cca 20% koncentrací leželo pod očekávaným instrumentálním detekčním limitem. Z výsledků je patrné, že při použití dynamické adaptivní korekce se dosahuje nízkých detekčních limitů na úrovni teoretických přístrojových hodnot a že je eliminován vliv různých atmosférických podmínek. Kompletní výsledky a další podrobné informace naleznete v aplikačním listu ***„Infrared Gas Identification in Any Conditions: XplorIR's Adaptive Atmospheric Correction“***, který si můžete stáhnout zde:

<https://drive.google.com/file/d/163au5Zhl3vTfgIeTJB6ImpbuLS9oKqNO/view?usp=sharing>

Další poměrně detailní informace naleznete také v záznamu webináře ***„RedWave & The Hazmat Guys On-Demand Webinar - Adaptive Atmospheric Correction“***, který byl věnovaný problematice Dynamické adaptivní korekci atmosférického pozadí: **Webinář si můžete prohlédnout na následujícím odkazu:**

<https://youtu.be/CDPHboMDXM0>

Aplikační list: Expanding Your Toolbox: Pairing Your PID with FTIR.

Tento aplikační list vysvětluje, proč je výhodné současné použití PID detektorů a spektrometrů XplorIR při řešení reálných incidentů. Například je možné okamžitě získat informaci o koncentraci dané látky – hodnotu získanou z PID je nutné vynásobit faktorem, který je platný pro příslušnou látku. XplorIR provede identifikaci látky a současně na displeji zobrazuje korekční faktor pro PID detektory. V aplikačním listu naleznete i další příklady.

Ke stažení zde: https://drive.google.com/file/d/1R_7lxA-Hsn7U52CeNZ6Kx_xYfkJQ_28e/view?usp=sharing

Webinář: The Transformative Impact of Gas Phase FTIR for Hazmat Operations

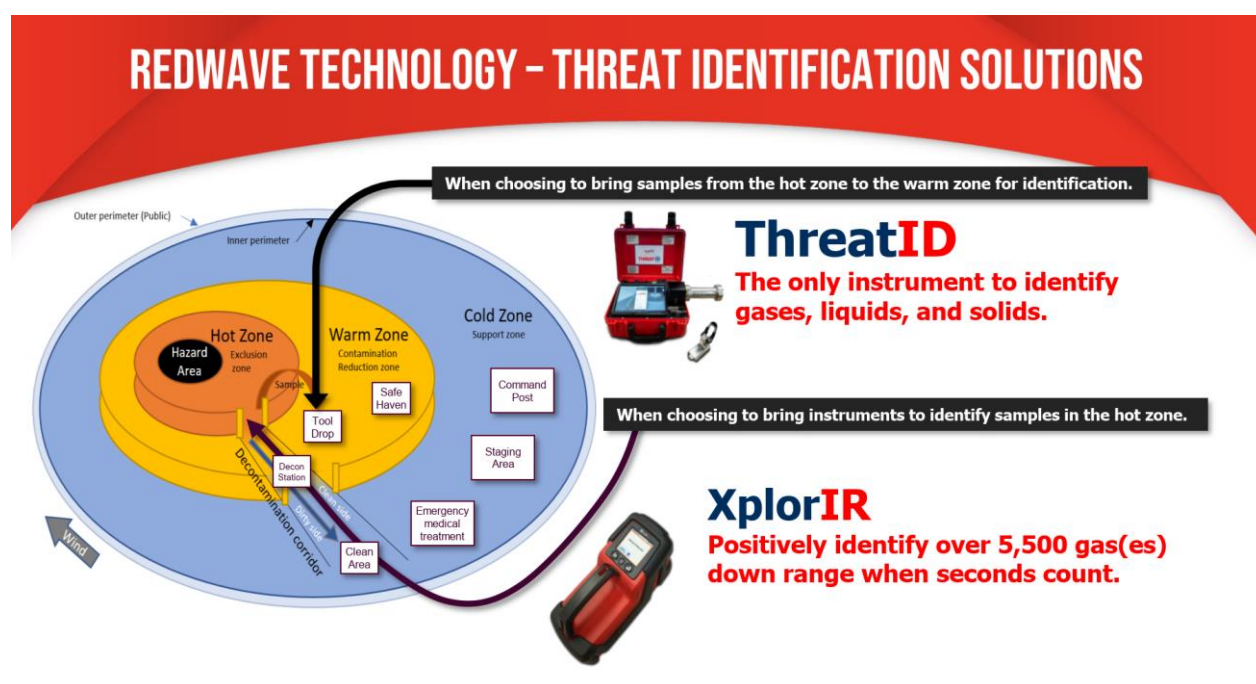
Pokud se zajímáte o terénní analýzu nebezpečných plynů, pak Vám doporučujeme tento webinář. Je zde velmi pěkná diskuse o využití FT-IR k analýze par a plynů, o pozici vůči kolorimetrickým testům (typicky Drager), gas multidektorům a PID. V druhé půlce je velmi zajímavá diskuse o pozici ručních hmotnostních analyzátorů (MX908) a mobilních GC-MS při řešení reálných situací.

The poster is for a webinar titled "THE TRANSFORMATIVE IMPACT OF GAS PHASE FTIR ON HAZMAT OPERATIONS". It features two speakers: Dr. Christina Baxter, who is associated with "HAZARD3 & EMERGENCY RESPONSE TIPS", and David Digregorio, who is a "FORMER DIRECTOR" at the "MA DEPARTMENT OF FIRE SERVICES, HAZMAT RESPONSE DIVISION". The event is scheduled for "TUESDAY, JULY 18 AT 11 AM (EST)". Logos for "RedWave TECHNOLOGY" and "HAZARD 3" are visible in the top right corner. The background of the poster shows a faint image of a person in a hazmat suit.

Ke zhlédnutí zde: <https://www.youtube.com/watch?v=OGESb6teopk>

Často setkáváme také s dotazy, jaký je rozdíl v použití spektrometrů **ThreatID** (umožňují analýzu kapalných, pevných i plynných vzorků) a **XplorIR**. Spektrometry ThreatID jsou určeny spíše pro mobilní laboratoře, které pracují na hranici hot zóny, ale nepracují přímo v hot zóně. Vyžadují odběr plynných vzorků v hot zóně (Tedlar bagy, stříkačky atd.) a jejich transport do mobilní laboratoře. Tyto spektrometry jsou svým výkonem také předurčeny k pokročilejším analýzám. Spektrometry XplorIR jsou určeny pro přímé nasazení v hot zóně s minimálními nároky na obsluhu a poskytují okamžitou informaci nebo možnost aktivního vyhledávání zdrojů/uniků atd. Přístroj je vybaven komunikací, která umožňuje přímé sdílení výsledků do cloudového řešení a tím jejich okamžitou kontrolu z prostředí mimo hot zónu.

Pěkně to vysvětluje obrázek níže:



Firma **RedWave** je relativně „mladou“ firmou, působící na trhu mobilních FT-IR spektrometrů cca 7 let, v loňském roce vstoupila nově také na Evropský trh. V pozadí této firmy stojí „matadoři“ vývoje mobilních FT-IR spektrometrů, kteří dříve působili ve firmách Smiths Detection, Thermo a A2 (nyní součást firmy Agilent). Nabízí tak největší kumulativní znalosti v oboru mobilních FT-IR spektrometrů a jejich přístroje vždy přichází s řešeními, která jsou „ušitá“ na základě reálných požadavků zákazníků. Současně se také snaží zaplňovat mezery na současném trhu (nabízet nová řešení, která doposud chyběla). Nikoho tak nepřekvapila rychlost, s jakou se tyto přístroje prosadili na trhu v USA (zde jsou již

jedničkou v oboru mobilních FT-IR). Přestože se v Evropě oficiálně nabízí spektrometry **firmy RedWave** cca 1,5 roku, je zde již více jak 100 spektrometrů ve výbavě First Responders týmů v řadě zemí, včetně České republiky. Firma RMI je výhradním zastoupením a servisním centrem pro Českou republiku, Slovensko, Maďarsko, Slovinsko, Chorvatsko a v případě servisu i další země. Naše servisní centrum je plně vybaveno a proškoleno na servis spektrometrů firmy RedWave a to včetně nového XplorIR. Jsme tak schopni rychle a flexibilně řešit případné servisní požadavky přímo zde v České republice.



Kontinuální monitorování vysoce toxických plynů a aerosolů **se systémem MX908/BEACON**

Všechny současná zařízení, která jsou používána pro kontinuální monitorování toxických látek v ovzduší při zabezpečení důležitých akcí, při ochraně mobilních základů nebo při ochraně VIP osob analyzují pouze plynnou fázi. Významným ohrožením jsou ale také aerosoly. Aerosolizované farmaceutické látky o vysoké toxicitě jsou dnes považovány za jednu z největších hrozeb, protože jsou snadno dostupné na drogové scéně ve velkých kvantitách. S aerosoly se ale setkáváme i u čtvrté generace bojových chemických látek (Novičoky) nebo v případě látek VX. Pěkně je tato problematika zpracována ve „*Responding to Chemical Warfare and Pharmaceutical Based Agents*“

Ke shlédnutí zde: <https://908-devices-ls.wistia.com/medias/61t736ub4a>

Prvním komerčně dostupným zařízením, které dokázalo současně monitorovat plynnou fázi i aerosol byl mobilní HPMS (High Pressury Mass Spectrometer) detektor **MX908** ve spojení s aerosolovým modulem **Aero**. O této problematice jsme psali již v našich Safety News 27, které jsou ke stažení zde.

http://www.rmi.cz/download.php?group=stranky3_soubory&id=2418

Toto zařízení se stalo v této oblasti „standardem“, primárně ale bylo určeno pro mobilní monitorování v terénu. Výrobce spektrometru nyní přišel s novinkou – modulem **BEACON**. Díky němu je možné proměnit ruční HPMS detektor MX908 v kontinuální monitor sledující současně plynnou fázi i aerosoly v ovzduší. Je možné snadno zapojit více jednotek do sítě, která pak může zabezpečit například stadion nebo větší plochu při konání velkých mítinků nebo sportovních akcí.



Vlastní set up je velmi jednoduchý a rychlý. Detektor MX908 se vloží do „kufříku“ BEACON a propojí se s jednotkou BEACON. Tím se zapojí do sítě internet a je možné sledovat prakticky libovolný počet jednotek na mobilních aplikacích nebo PC. Během ochrany velkých akcí také často nastává situace, že se na zajištění podílí více státních organizací nebo více různých složek, každá může mít své jednotky MX908. Jakýkoliv detektor MX908 s aerosolovým nástavcem je možné vložit do jakéhokoliv BEACONU, automaticky se propojí, na displeji MX908 se vygeneruje QR kód a https adresa s kódem. Každý, kdo má mobilní aplikaci, si načte QR kód (je možné ho i sdílet) a má přístup ke sledování dané jednotky na mobilu nebo tabletu, stejně tak po zadání https adresy se otevře na PC aplikace a kdo zná přístupový kód, může jednotku sledovat (v jednom okně až 8 jednotek). Zabezpečení velkých akcí

se tak stává jednoduchou a velmi rychlou operací, během několika minut máte plně funkční zabezpečenou monitorovací síť a to i při účasti více organizačních složek se svojí technikou.

MX908 Beacon



Pokud máte zájem o získání podrobnějších informací, tak nás prosím kontaktujte. Můžete se také podívat na podcast „**The New MX908 Beacon for Area Monitoring**“, k prohlédnutí zde: [Podcast: The New MX908 Beacon for Area Monitoring - 908 Devices](#)

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