



Nové možnosti analýzy
nebezpečných látek pomocí
infračervené a Ramanovy
spektroskopie

RNDr. František Kesner Ph.D.



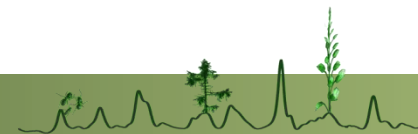


Obsah:

- Srovnání infračervené a Ramanovy spektroskopie
- Ramanovo záření versus fluorescence

- Ramanovy spektrometry s budícím laserem 1064nm
- Ramanovův spektrometr s budícím laserem 248nm

- Analýza plynů a par pomocí mobilního FTIR spektrometru TreatID





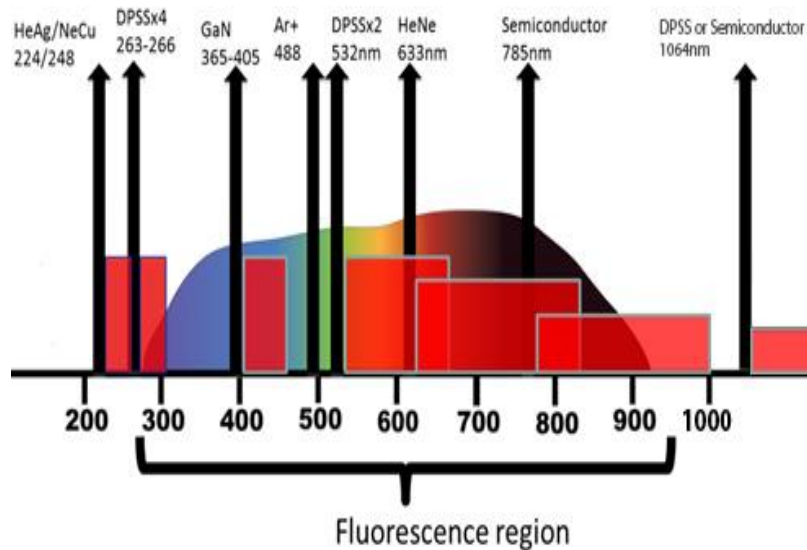
Srovnání infračervené a Ramanovy spektroskopie

Ramanova spektroskopie	Infračervená spektroskopie
Rozptyl světla vibrující molekulou	Absorpce světla vibrující molekulou
Vibrace je aktivní v Ramanově spektru způsobuje-li změnu polarizovatelnosti	Vibrace je aktivní v IR spektru způsobuje-li změnu dipólového momentu
Mikroskopie s rozlišením pod 1 mikrometr	Mikroskopie s rozlišením okolo 15 mikrometrů (difrakční limit!)
Vodu lze použít jako rozpouštědlo	Voda má obrovskou absorpci v IR spektru, problém pro využití jako rozpouštědla
Příprava vzorku většinou žádná, možnost měření přes obaly (sklo, sáčky atd.)	Příprava vzorku může být náročná: tvorba KBr tablet, řezání vzorků, rozpouštědla, extrakce atd.
Signál základního skeletu resp. vazeb v molekule. -S-S-, -C-S-, -C=C- atd	Koncové skupiny molekuly - intenzivní signál
Indikace kovalentního charakteru molekuly	Indikace iontového charakteru molekuly
Rozsah měření: tzv. FAR-IR ($400 - 50 \text{ cm}^{-1}$) není problém (anorganika!)	FAR-IR relativně náročná instrumentace
Cena je v porovnání s IČ většinou vyšší	Cena je v porovnání s Ramanem většinou nižší



Fluorescence: hlavní nepřítel Ramanovy spektroskopie:

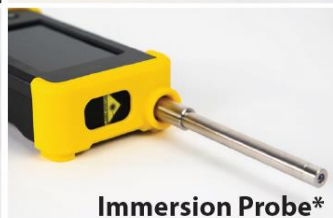
- Dochází k ní zejména v případě excitace laser. zářením z NIR/VIS oblasti (cca. 300 – 900nm)
- Je způsobena vlastním materiálem - tj. běžné proteiny, pigmenty, zbarvení vzorku nebo nízkými hladinami nečistot v materiálu (obtížně odstranitelné bez rozsáhlých kroků čištění)
- Řešením je použití jiné vlnové délky budícího laseru: např. **1064nm (TacticID-1064 nebo TacticID Mobile)** nebo „hluboká“ UV excitace (méně než 250nm) např. **Standoff 200**



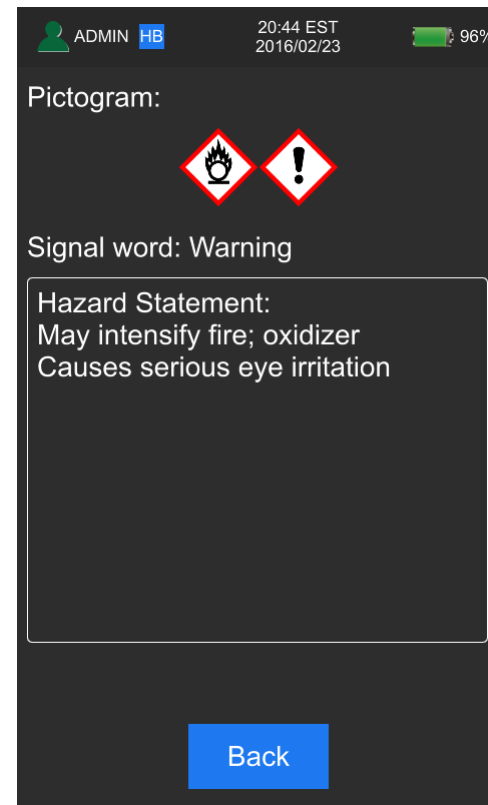
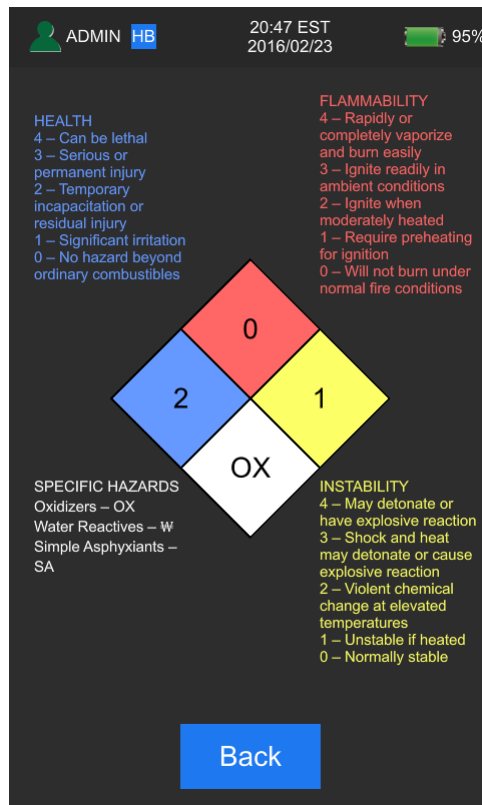
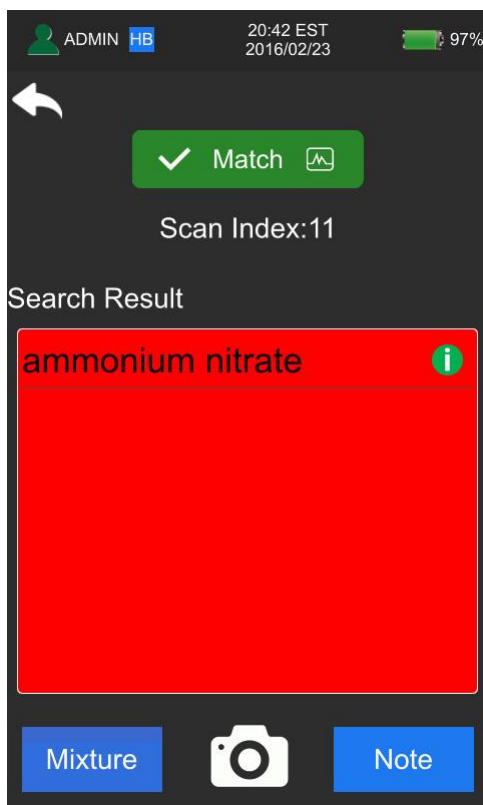


TacticID-1064, TacticID-1064 ST, TacticID Mobile,...

- Excitační laser: 1064nm
- Nastavitelnost intenzity laserového záření po 1%
- Odložený start
- Vestavěný fotoaparát
- Baterie: nabíjecí Li-ion baterie, operační čas více jak 4 hodiny
- Obsáhlé knihovny narkotik a dalších nebezpečných látek



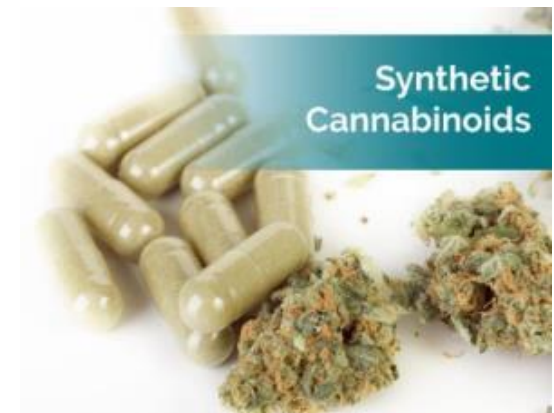
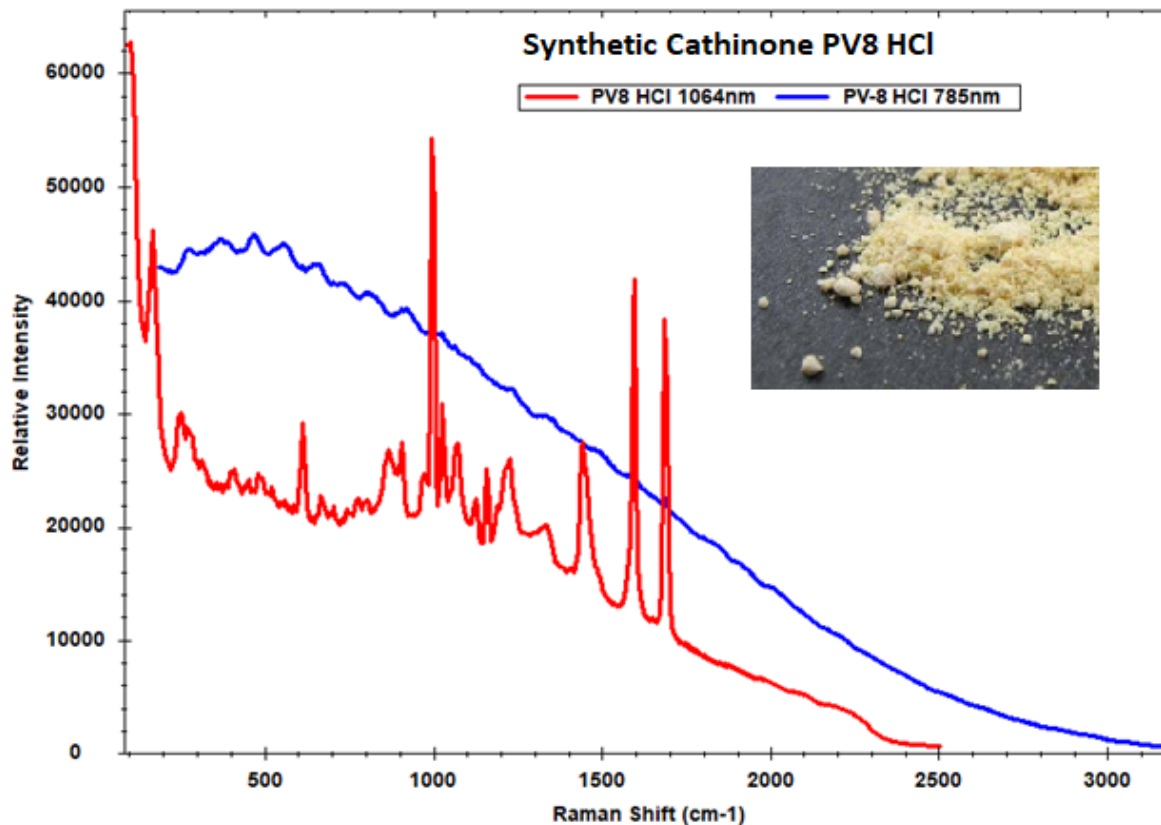
Tactic 1064 - software



Doplňkové informace GHS (globálně harmonizovaný systém) a NFPA 704 - standardní normy v USA založené Národním sdružením protipožární ochrany.

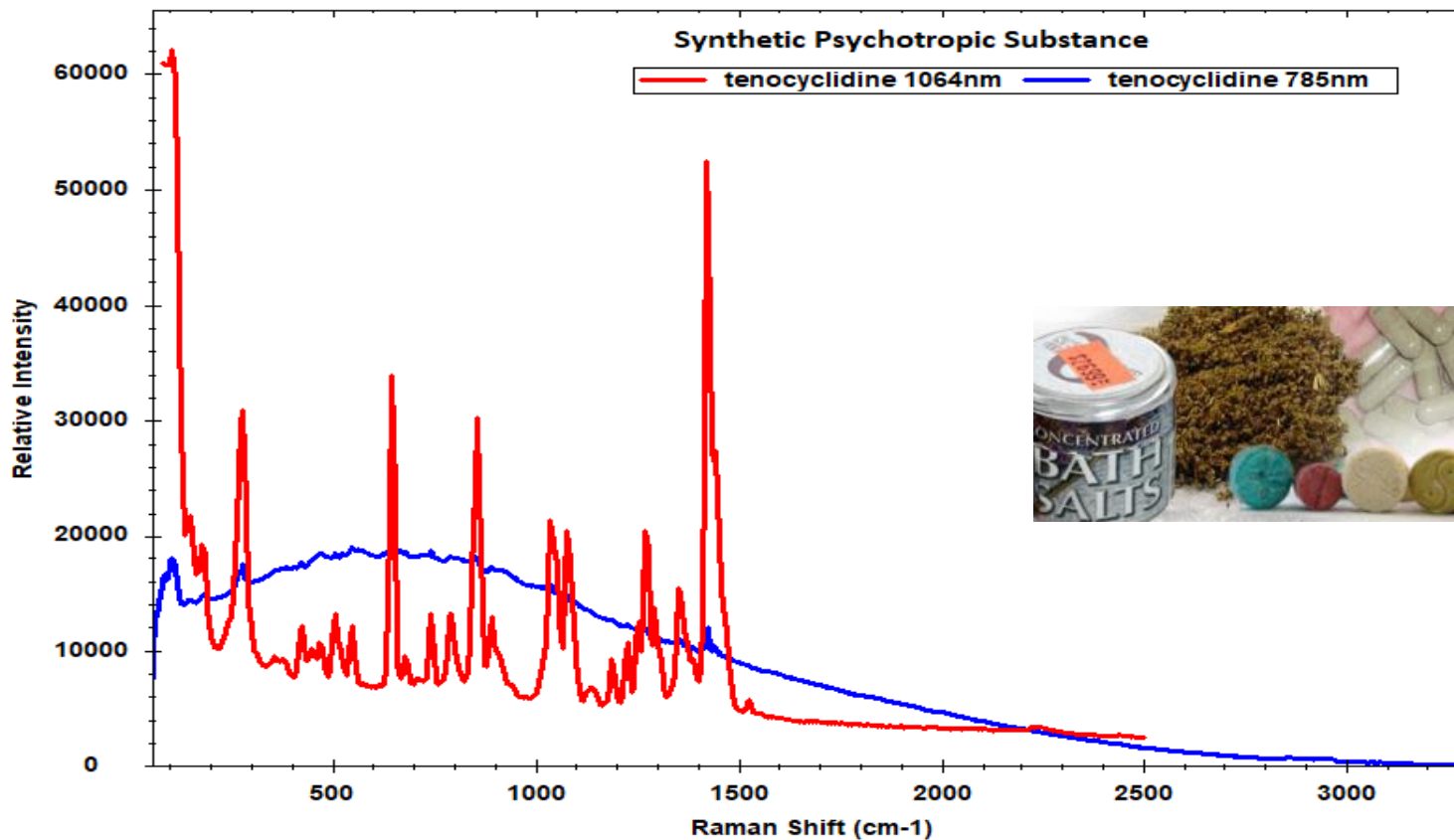
Srovnání Ramanových spekter s budícím laserem 785nm versus 1064nm

Syntetické kanabinoidy a katinony



Srovnání Ramanových spekter s budícím laserem 785nm versus 1064nm

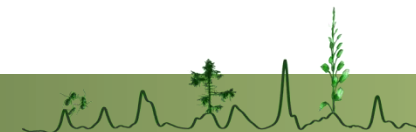
Psychoaktivní látky na vzestupu



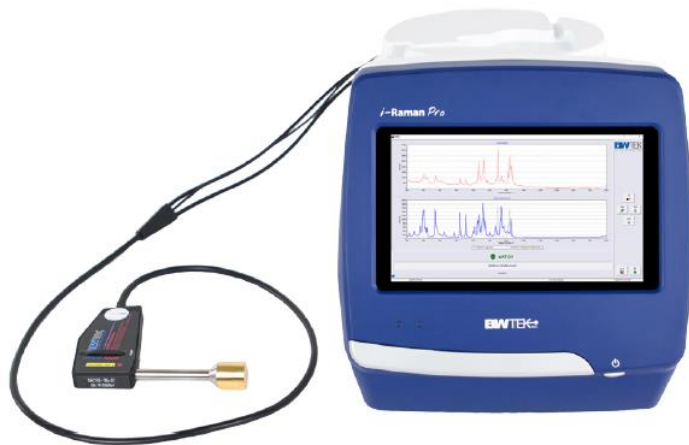
Měření přes transparentní obaly a jejich typické tloušťky



lahve	tloušťka
Amber Glass	< 2 mm
Clear Glass	< 3 mm
High Density Polyethylene (HDPE)	< 1 mm
Teflon FEP	< 1 mm
Polystyrene	< 1 mm
vialky	
Amber and Clear Glass	< 1 mm
pytlíky	
Polypropylene (PP)	< 0.1mm
Polyethylene (PE), Low-Density Polyethylene (LDPE)	< 0.1mm



STRam - měření skrz netransparentní obaly, např. obálky, plastové kontejnery,...(1064nm)



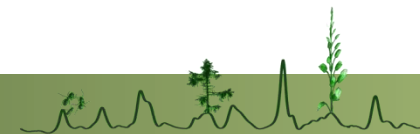


TacticID®-1064: Technologie STRaman®

- Technologie ST (See Through) umožňuje měření přes neprůhledné materiály/obaly – papír, bílé plastové lahve, obálky manila&Tyvek®...
- Volitelný balíček STRaman Sampling Kit pro TacticID-1064
- Měří velkou oblast vzorku s větší hloubkou pronikání – ideální pro analýzu směsí pevných látek
- Nižší výkon (energie) laseru pro bezpečnější měření potenciálně výbušných nebo hořlavých látek (nestabilních vzorků)



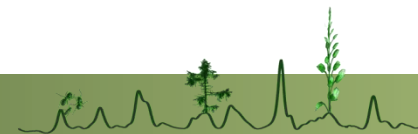
*STRaman Sampling Kit
(optional)*



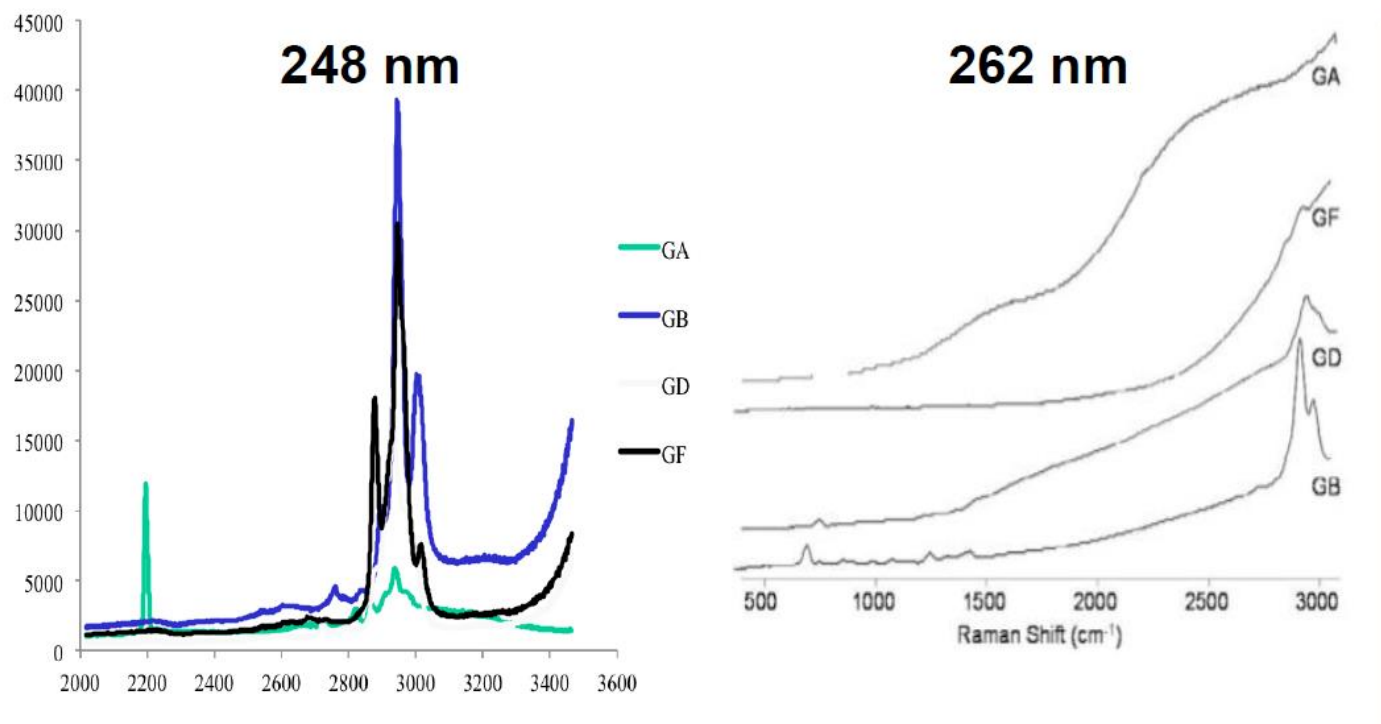
Hluboká UV excitace Raman/Fluorescence: STANDOFF 200



- měří jak fluorescenční spektrum, tak Ramanovo spektrum
- obsahuje knihovny: chemických, biologických a explosivních materiálů
- pracovní vzdálenost od 0,6 až 5 metrů (pro fluorescenční spektrum)
- autofocus
- Zářivky a slunce nemají vliv
- Spektrální rozsah od 250 do 4000 cm^{-1} pro Ramanovo spektrum
- Spektrální rozsah od 270 nm do 320 nm pro fluorescenční spektrum
- Časové razítko, GPS souřadnice, fotografie
- Komunikace pomocí WiFi/Bluetooth
(Android/ATAK/MFK), plus USB 3.0 s PC
- Hmotnost 4,5 kg
- -40 až +60 °C, IP 67
- Lze připojit k robotu či dronu a řídit z dálky

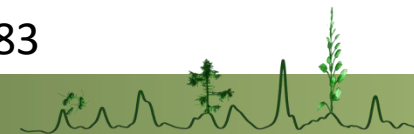


Srovnání citlivosti excitačních linií v UV oblasti (248nm versus 262nm)



Příklad G Agents = nervové bojové otravné látky
 GA – Tabun, GD – Soman, GB – Sarin a GF – Cyklosarin

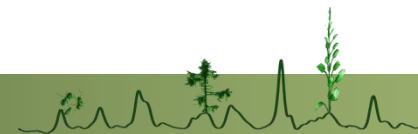
Adapted from Christesen, SD et al. Appl Spec. 2008 Oct; 62(10):1078-83





UV Raman: Výhody UV excitace

- **Sluneční a umělé světlo:** Při excitaci pod 250 nm je Ramanův signál mimo sluneční záření i oblast fluorescence
- **UV excitace umožňuje vyšší citlivost a specifitu:** V porovnání s RS ve viditelné a IR oblasti umožňuje detekci celého spektra včetně fluorescence neznámých látek
- **Malá hloubka pronikání:** Rozlišení vzorku na povrchu od matrice nebo substrátu, použití pulzů měkkého UV záření (deep UV laser) navíc předchází poškození vzorku
- **Malé riziko poškození očí a kůže:** Z důvodu malé hloubky pronikání se záření nedostane na sítnici. Nebezpečí poškození kůže se v podstatě neliší od působení slunečního záření.
- **Detekce širokého spektra biologických materiálů**



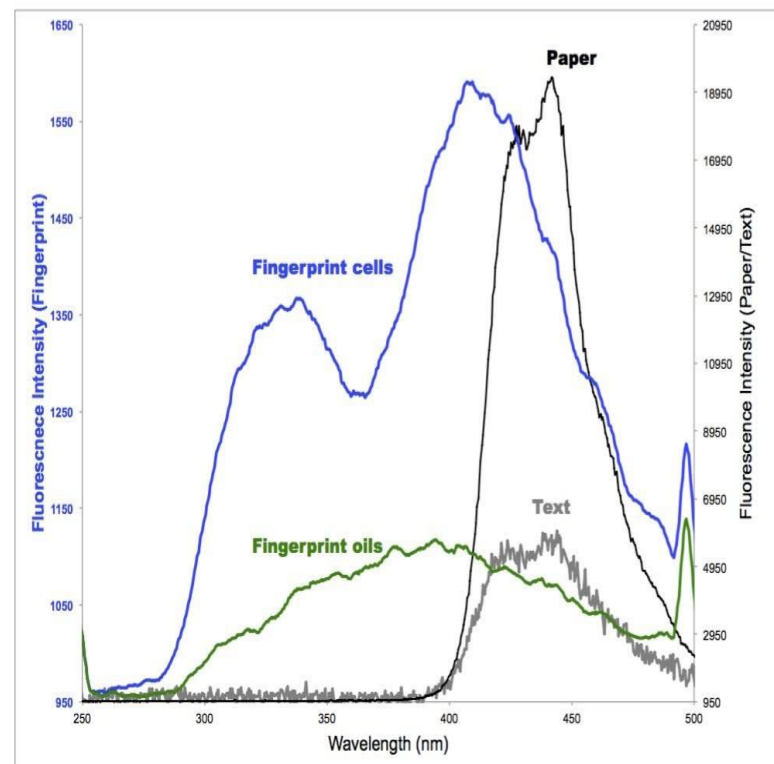


UV Raman: Detekce otisků prstů

Detekce otisků prstů a jejich analýza zpravidla vyžaduje použití detekčních látek jako např. Ninhydrin pro zvýšení kontrastu mezi otiskem a jeho pozadím.

Velkou výzvou v analýze otisků prstů je její provedení bezkontaktní, neinvazivní a nedestruktivní metodou.

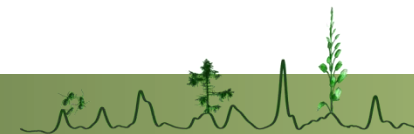
Deep UV fluorescenční imaging = detekce otisků prstů + jejich chemické složení



DUV fluorescence (vlevo) vs.

Ninhydrin (vpravo) na bílém papíře

Girod A., Ramotowski R., Weyermann C., Composition of fingerprint residue: a qualitative and quantitative review. Forensic Science International 223(1.3), pp. 1024, 11 2012



ThreatID - mobilní FTIR spektrometr s 10'' displejem




Sample 2020-06-01T14:37:57

REACHBACK EMAIL BT

Acetone

DANGER

Flammable Health hazard Harmful

Common Name: Acetone
Synonyms/Trade names: 2-propanone; propanone; Dimethyl ketone

IDLH: 2500 ppm	Cas Number: 67-64-1
Flash Point:	UEL: 12.80%
Melting Point: -93.89 C (-137.0 F)	LEL: 2.50%
Boiling Point: 56.11 C (133.0 F)	IP: 9.69 eV
Vapor Pressure: 180 mm Hg	Solubility: Miscible
Density: 2	Specific Gravity: 0.79

Chemical Use:
 Industry uses: Adhesives and sealant chemicals, Agricultural chemicals (non-pesticidal), Fuels and fuel additives, Functional fluids (closed systems), Intermediates, Ion exchange agents, Laboratory chemicals, Material is imported as a component of a complete formulated mixture which is sold for use in automotive refinishing, Paint additives and coating additives not described by other categories, Paper waterproofing, Photosensitive chemicals, Processing aids, not otherwise listed, Processing aids, specific to petroleum production, Propellants and blowing agents, Solvents (for cleaning and degreasing), Solvents (which become part of product formulation or mixture), Surface active agents, Viscosity adjusters

Sample

Acetone
 SIAL_ATR-IR
 Score: 0.999
 CAS: 67-64-1

(+)-1-(9-Fluorenyl)ethyl chloroformate solution
 SIAL_ATR-IR
 Score: 0.997
 CAS: 107474-79-3

5-Oxohexanenitrile
 SIAL_ATR-IR
 Score: 0.855
 CAS: 10412-98-3

COLLECT ANOTHER SAMPLE



Konfigurace systému



THREAT ID

GLS

- The only FTIR chemical analyzer with Interchangeable ATR and 4 meter gas cell
- 23,000+ solids and liquids spectra, and 5,000+ gases and vapors library on-board
- Pre-loaded with THREATASSIST software
- 24/7/365 Reachback



THREAT ID

G

- Dedicated vapor and gas analyzer
- 5,000+ gases and vapors
- Pre-loaded with THREATASSIST Software
- 24/7/365 Reachback
- Future upgrade to GLS system possible

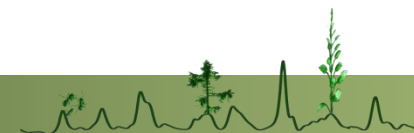
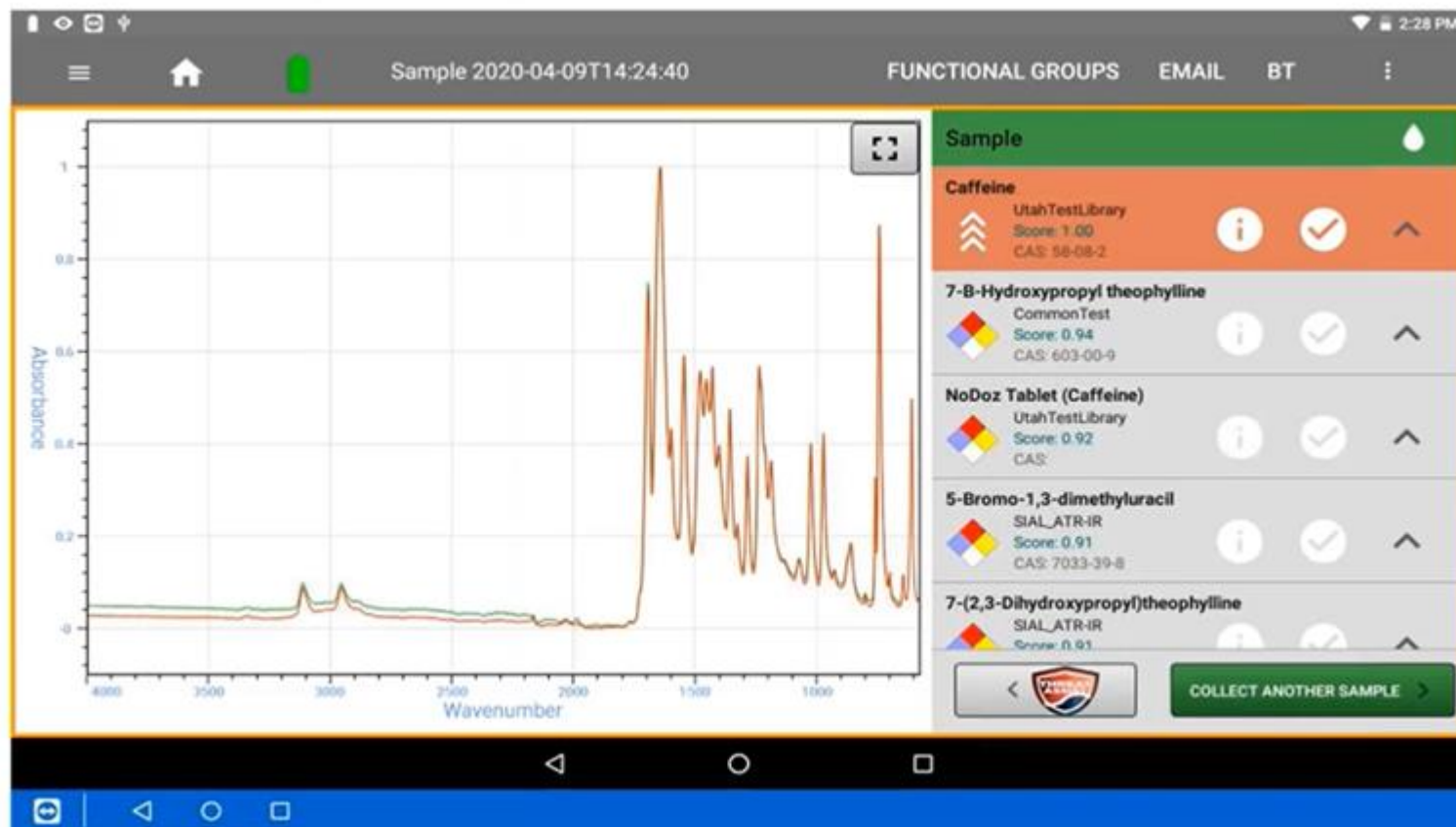


THREAT ID

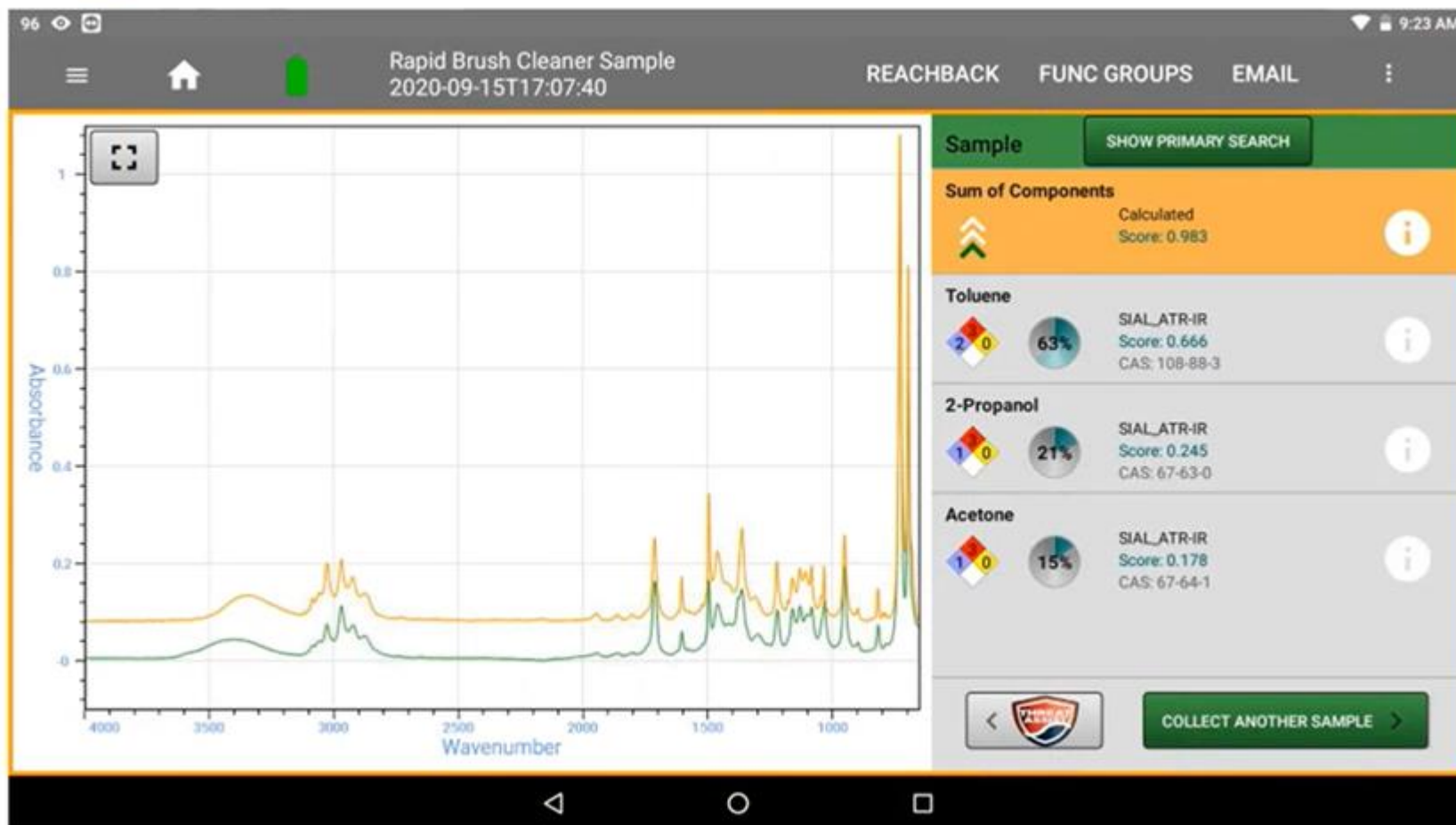
LS

- Advanced version of traditional FTIR solid and liquid analyzer
- 23,000+ solids and liquids spectra library
- Pre-loaded with THREATASSIST Software
- 24/7/365 Reachback
- Future upgrade to GLS system possible

Ukázky software - identifikace čistá látka



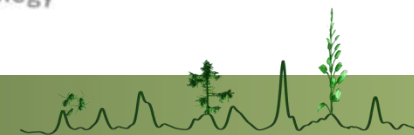
Ukázky software - identifikace směs



Ukázky software - funkční skupiny



Copyright © RedWave Technology





Videa:

<https://redwavetech.org/wp-content/uploads/2021/05/Gas-Cell-Module.mp4>

https://redwavetech.org/wp-content/uploads/2021/05/Powder_Liq-Revised-1.mp4

<https://redwavetech.org/wp-content/uploads/2021/04/webinar-3-trimmed.mp4>

<https://youtu.be/fRszEhoF8M8>

<https://youtu.be/e2xLw0tJVM8>

<https://youtu.be/3O8tg6ChSel>

<https://youtu.be/ETLqDsOASOw>

<https://youtu.be/5X3-QWqtZ5Q> - seminář



Děkuji za pozornost

František Kesner

Kesner@nicoletcz.cz

603 554 788

