

Nota techniczna



Wykorzystanie funkcji LowDoseID w analizatorze GEMINI w identyfikacji niskich stężeń narkotyków

RAYTECH

Wstęp

Wytwarzanie, rozprowadzanie i używanie nielegalnych narkotyków jest ciągle narastającym problem na całym świecie. Zdolność wykrywania i identyfikowania tego rodzaju substancji bezpośrednio w terenie pełni bardzo ważną rolę w walce z tym problemem. Jednym z aparatów, który odnosi duże sukcesy w zakresie wykrywania i identyfikacji narkotyków jest analizator GEMINI. Aparat ten jest jedynym ręcznym urządzeniem na świecie, który łączy dwa spektrometry podczerwieni (FTIR) i Ramana w jednym urządzeniu. Te dwie spektroskopie są technikami komplementarnymi i zwiększają możliwości identyfikacji nieznanymi substancjami w terenie.

Spektroskopia FTIR i spektroskopia Ramana są doskonałymi metodami analitycznymi do identyfikacji nielegalnych narkotyków w czystej postaci i w wysoko stężonych mieszaninach. Jednak w próbkach „ulicznych” narkotyków często spotykane stężenia są niskie (1- 10 % mas.). Wykrycie substancji narkotycznych występujących w niskich stężeniach może być dość trudne przy zastosowaniu standardowych spektrometrów Ramana czy FTIR. Aby jeszcze bardziej rozszerzyć możliwości identyfikacyjne analizatora GEMINI wprowadzone zostało nowe opcjonalne oprogramowanie o nazwie LowDoseID™. Dzięki temu aparat GEMINI zyskał dwie nowe funkcjonalności:

1. Możliwość korzystania z SERS (powierzchniowo wzmocniona spektroskopia Ramana) w oparciu o pakiety typu H dobrze znane z analizatorów typu TruNarc.
2. Dodanie drugiego algorytmu identyfikacyjnego zwanego Screener

Pakiety typu H oparte na technice SERS

SERS jest techniką analityczną, w której molekuly substancji są najpierw adsorbowane na powierzchni specjalnie zmodyfikowanego metalu. Tak naniesione cząsteczki badanej substancji wykazują znacznie mocniejsze rozproszenie Ramana, które rejestrowane jest w postaci znacznie silniejszego sygnału podczas analizy. To wzmocnienie może być nawet o kilka rzędów wielkości większe, niż podczas „normalnej” analizy. Pozwala to na wykrycie substancji znajdujących się na niskich stężeniach w badanych tabletkach czy proszkach.

Nasz pakiet typu H składa się z dwóch elementów. Pierwsza część to patyczek testowy, wykonany z tworzywa sztucznego. Na jego końcu znajduje się specjalnie zmodyfikowana metalowa płytka - powierzchnia zawierająca podłoże SERS. Drugi element pakietu to fiolka z rozpuszczalnikiem (metanol lub etanol).





Aby skorzystać z tego zestawu operator pobiera niewielką ilość (zazwyczaj 2 - 4 mg) badanej substancji i umieszcza ją we fiolce z rozpuszczalnikiem. Po rozpuszczeniu jak największej ilości substancji i pozwalając aby pozostałe zanieczyszczenia osiadły na dno, zanurza się patyczek testowy, tak aby cała końcówka SERS była przykryta cieczą. Po chwili patyczek należy wyjąć i całkowicie osuszyć z pozostałości rozpuszczalnika. Po wyschnięciu patyczek testowy umieszcza się w specjalnym adapterze mocowanym do końcówki sondy pomiarowej i przystępuje się do pomiaru analizatorem GEMINI.



Nowy algorytm SCREENER

Oprócz standardowej identyfikacji widmowej Ramana (ID) nowe opcjonalne oprogramowanie LowDoseID posiada drugi algorytm analityczny zwany Screener. Ten algorytm jest bardzo podobny do tego, który znajduje się w analizatorach TruNarc™. W przeciwieństwie do standardowego algorytmu identyfikacyjnego, który odpowiada na pytanie "Jakie nieznanne substancje są obecne w mojej próbce?", nowy algorytm Screener odpowiada na pytanie "Czy interesująca mnie substancja znajduje się w badanej próbce?" Algorytm Screener może analizować zarówno klasyczne widma Ramana, jak i widma SERS.

Algorytm Screener korzysta z pliku Alert Configuration, który zawiera listę substancji których w danym momencie szuka operator. Po zakupie aparat dostarczany jest z fabrycznie utworzoną listą 600 narkotyków i substancji psychoaktywnych. Substancje te są zaklasyfikowane do jednej z trzech kategorii: Alarm, Ostrzeżenie, albo Bezpieczne.

Użytkownik może stworzyć swój własny, niestandardowy plik poprzez modyfikację pliku Alert Configuration. Substancje na tej liście mogą być dowolnie modyfikowane, można zmieniać ich klasyfikację a także można dodawać do listy substancje z biblioteki aparatu GEMINI lub z biblioteki własnej użytkownika w aparacie.

Po zakończeniu analizy, algorytm Screener będzie wyświetlać wyniki w sposób hierarchiczny. Jeśli jeden lub więcej substancji zaklasyfikowanych jako alarmowe zostaną zidentyfikowane, wtedy tylko one będą wyświetlane na ekranie urządzenia. Nawet jeśli w mieszaninie zostaną również wykryte substancje zaklasyfikowane jako Ostrzeżenie lub bezpieczne, nie zostaną wyświetlone. Jeśli nie zostaną zidentyfikowane żadne substancje alarmowe, wówczas zostaną wyświetlone wszystkie zidentyfikowane substancje zaklasyfikowane jako ostrzeżenie. Jeżeli na ekranie wyświetlone zostaną substancje zaklasyfikowane jako bezpieczne to oznacza, że nie zostały wykryte substancje zaklasyfikowane jako alarm lub ostrzeżenie. W standardowym algorytmie identyfikacji nie stosuje się klasyfikacji i wszystkie zidentyfikowane substancje są wyświetlane na ekranie jednocześnie.

Identyfikacja nielegalnych substancji

Analizator Gemini z LowDoseID ma możliwość identyfikacji ponad 700 nielegalnych narkotyków, w tym fentanylu, heroiny, kokainy, metamfetaminy, analogów fentanylu, syntetycznych opioidów, fenyloamin, syntetycznych kannabinoidów i katynonów. Biblioteka analizatora zawiera również liczne prekursorzy oraz wiele różnych środków wypełniaczy. Każda z tych substancji może być przeniesiona z biblioteki do Konfiguracji Alarmów Ekranowych (Screener Alert Configuration). Biblioteka zawiera również 40 widm SERS popularnych narkotyków i wypełniaczy do stosowania wraz z algorytmem Screener. Oprogramowanie analizatora ma formę otwartą, więc operatorzy mają dowolność w rozbudowywaniu jej o nowe substancje.

Podsumowanie

Analizator Gemini z opcjonalnym oprogramowaniem LowDoseID rozszerza i ulepsza możliwości aparatu w zakresie identyfikacji narkotyków i substancji psychoaktywnych. Te nowe możliwości urządzenia pozwalają na wykrywanie niskich stężeń leków/narkotyków w mieszaninach i tabletkach.