

# Идентификация запрещенных препаратов и опасных соединений с помощью ИК-Фурье спектрометра Agilent 4500a FTIR

## Методическая информация

### Авторы

Алан Рейн (Alan Rein)  
Шеннон Ричард (Shannon Richard)  
Agilent Technologies, Inc.



Рис. 1. Портативный спектрометр Agilent 4500a FTIR, оснащенный приставкой НПВО с алмазным кристаллом. Система полностью портативна, с питанием от батареи, вес менее 6,8 кг.

### Введение

ИК-Фурье Спектроскопия— мощная проверенная технология, применяемая для анализа запрещенных веществ и потенциально опасных соединений. Ее эффективность обусловлена возможностью быстро провести анализ и, получив молекулярный профиль вещества, сравнить его с библиотечными спектрами известных соединений. Таким образом, идентификация неизвестного жидкого или твердого вещества может быть проведена менее чем за 1 минуту практически без пробоподготовки.

Проведение внелабораторного анализа с помощью портативной ИК-Фурье системы особенно удобно, поскольку ее можно использовать с целью достаточного обоснования изъятия материала для дальнейшего анализа. Кроме того, это уменьшает аудит и сокращает цепь доказательств, предотвращая возможные нарушения в ходе расследования. Некоторые ИК-Фурье спектрометры проектируются для эксплуатации в наиболее жестких условиях, таких как горячие зоны; эти спектрометры как правило дорогостоящие, поскольку они должны быть водонепроницаемыми и устойчивыми к хлорсодержащим дезинфицирующим растворам, используемым для санитарной обработки. Спектрометр Agilent 4500a FTIR — лучшее и экономичное решение для определения фальсифицированных и запрещенных лекарственных препаратов, а также опасных веществ (рис. 1). В данном обзоре продемонстрировано использование спектрометра Agilent 4500a FTIR, оснащенного приставкой НПВО с алмазным кристаллом и предназначенного для быстрой идентификации ряда запрещенных препаратов.

Для сотрудников органов пограничного контроля, системы корпоративной безопасности, службы безопасности почтовых отделений, а также для специалистов, занимающихся пресечением оборота наркотических средств и фальсифицированных фармацевтических препаратов, портативный спектрометр 4500a FTIR станет мощным подспорьем в решении важнейших задач, например идентификации белых порошков, неизвестных химикатов, взрывчатых веществ и запрещенных препаратов.



**Agilent Technologies**

## Быстрый и точный анализ неизвестных веществ

Спектрометр 4500a FTIR позволяет сотрудникам правоохранительных органов проводить оперативную идентификацию химических веществ непосредственно на месте происшествия. Эта мощная, полностью портативная система измеряет и идентифицирует неизвестные химические вещества, будь то твердые тела, пасты, гели или жидкости.

Портативный спектрометр 4500a FTIR обладает следующими преимуществами.

### Универсальность:

- Полная портативность для проведения исследований непосредственно на месте происшествия или установки в передвижных полевых лабораториях.
- Быстрое сканирование с мгновенными результатами позволяет получить более полное представление о масштабах происшествия и своевременно принять соответствующие решения.

### Простота использования:

- Управление и анализ полностью контролируются посредством портативного компьютера с упрощенным пользовательским интерфейсом, с помощью которого проводится сбор и анализ данных, а также составление отчетов о полученных результатах. Предустановленные методы позволяют запустить анализ нажатием одной кнопки.
- Приставка НПВО с алмазным кристаллом упрощает анализ твердых тел и жидкостей, в то же время защищая датчик от химического воздействия и механических повреждений.
- Измерение твердых и жидких образцов неизвестного состава занимает менее 1 минуты без какой-либо пробоподготовки.

### Эффективность:

- Оптомеханические компоненты анализатора и электроника разработаны таким образом, чтобы обеспечивать максимальную эффективность, прочность, надежность эксплуатации и достоверность результатов.
- Принцип работы прибора основан на методе инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье, который широко используется в сфере судебно-медицинской экспертизы.
- Мощный алгоритм поиска в сочетании с обширной встроенной библиотекой опасных веществ и запрещенных препаратов позволяет моментально получать точные результаты.
- Выполняется точная идентификация вещества, а также степень его соответствия известному веществу, найденному в библиотеке.
- В библиотеке Agilent по судебно-медицинской экспертизе содержится более 13 000 спектров биохимических веществ, белых порошков, химикатов массового производства, пищевых добавок, токсичных и взрывчатых веществ.

## Оборудование, материалы и методы

С помощью спектрометра Agilent FTIR, оснащенного приставкой нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) с алмазным кристаллом с одинарным отражением, были измерены образцы распространенных уличных наркотиков, в том числе гидрохлорид кокаина, кокаиновое основание,

диацетилморфин, гидрохлорид морфина и кетамин. Спектры были получены при разрешении  $4 \text{ см}^{-1}$ , при этом общее время измерения составило менее минуты. Для удобства сравнения применяли алгоритм поиска, основанный на простом измерении коэффициентов сходства.

Образец, который содержал приблизительно 5 мг твердого вещества, поместили на датчик НПВО с алмазным кристаллом. Для обеспечения надлежащего контакта образца с датчиком использовали пресс НПВО для твердых веществ. Для идентификации неизвестных порошков использовали библиотеку Agilent по судебно-медицинской экспертизе. После измерения провели очистку прибора, которая заключалась в промывке датчика небольшим количеством ацетона, чтобы удалить само соединение и оставшиеся следы. Все данные были автоматически занесены в журнал с указанием даты и времени.

## Результаты и обсуждение

Пять образцов запрещенных препаратов измерили, а затем провели поиск по спектрам эталонных соединений из библиотеки Agilent по судебно-медицинской экспертизе. Данный анализ проводили с помощью портативного компьютера и ПО MicroLab Mobile; в результате анализа были получены точные совпадения и установлена идентичность соединений (пример: рис. 2). Результаты последующих анализов с использованием ноутбука с установленным ПО Agilent MicroLab показаны на рис. 3. В последнем случае функция автоматического поиска отображает спектр неизвестного образца, спектр библиотечного соединения, определенного как максимальное совпадение, идентичность неизвестного соединения, а также количественные показатели совпадения.

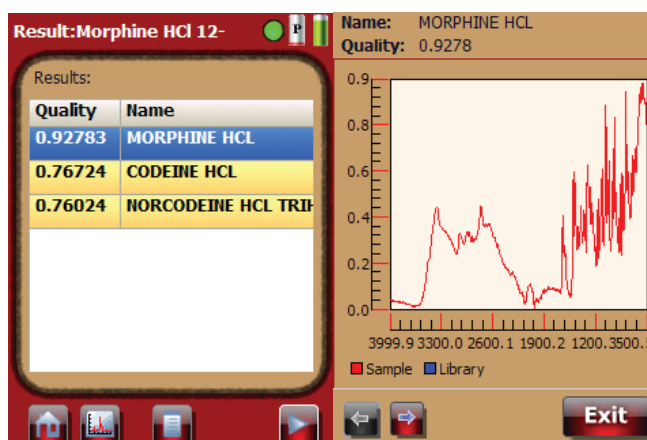


Рис. 2. После получения спектра неизвестного соединения, предустановленный метод автоматически производит поиск соответствующих соединений во встроенной библиотеке по судебно-медицинской экспертизе и выводит данные об идентичности неизвестного соединения, степени совпадения, а также спектр материала на портативный компьютер.

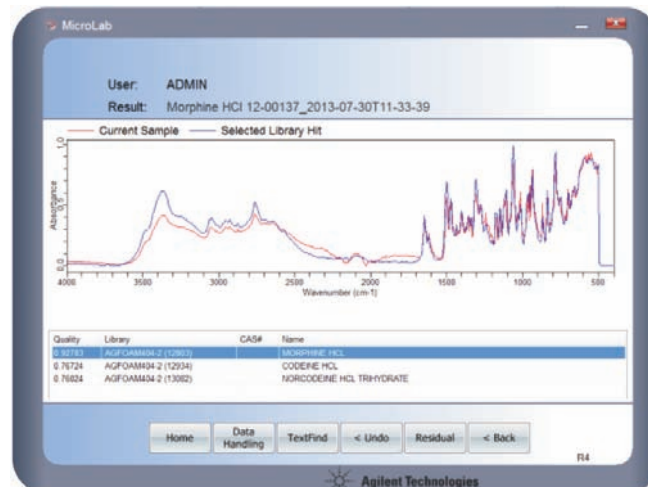
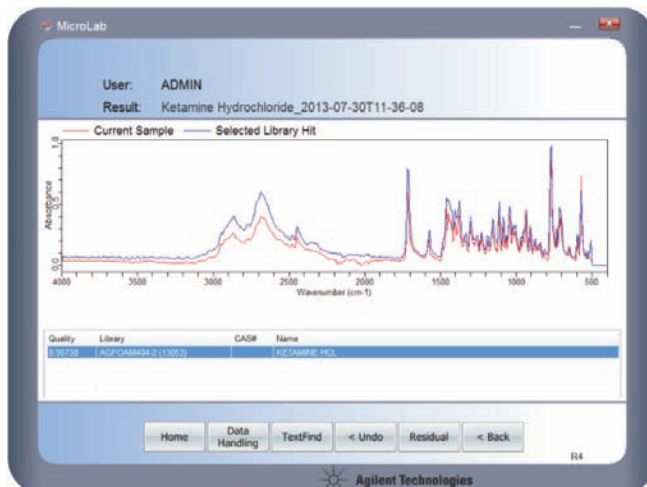
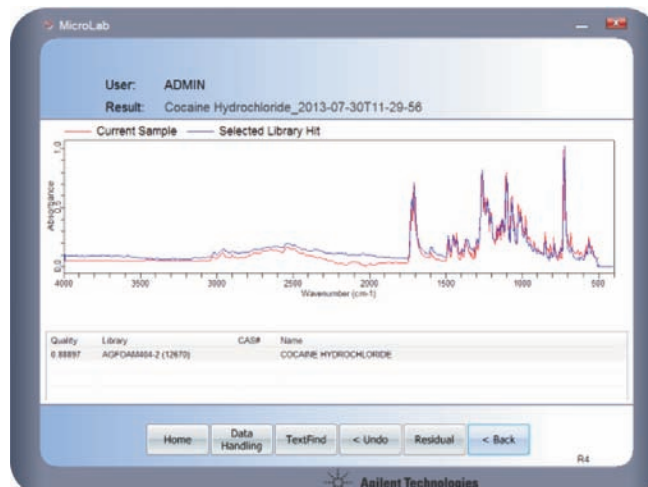
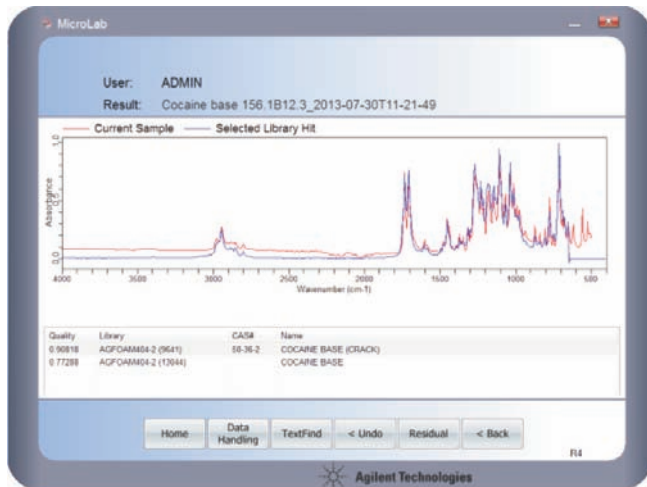


Рис. 3. Спектрометр Agilent 4500a FTIR можно подключать к ноутбуку для дополнительного анализа спектров. В этом случае проводится поиск спектров различных уличных наркотиков неизвестного состава в библиотеке Agilent по судебно-медицинской экспертизе, что дает превосходные результаты. Помимо идентификации вещества программа выводит спектры неизвестного образца и соединения из встроенной библиотеки, определенное как максимальное совпадение, а также количественные показатели совпадения.

## Заключение

Специалистам, занимающимся обнаружением и идентификацией запрещенных контрабандных препаратов (включая уличные наркотики и фальсифицированные фармацевтические препараты), а также анализом неизвестных химикатов и взрывчатых веществ, необходимы средства измерения, которые позволяли бы им получать результаты непосредственно на месте происшествия. Портативный инфракрасный спектрометр Agilent 4500a FTIR с питанием от батареи представляет собой точный и экономичный прибор для получения этой информации. Он позволяет немедленно принимать правильные решения с учетом собранных доказательств и помогает предотвратить возможные нарушения в ходе расследования.

## Дополнительные сведения

В настоящем документе приведены типичные результаты. Подробно о продуктах и услугах компании Agilent: [www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem).

[www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem)

Компания Agilent не несет ответственности за возможные ошибки в настоящем документе, а также за убытки, связанные или являющиеся следствием получения настоящего документа, ознакомления с ним и его использования.

Информация, описания и технические характеристики в настоящем документе могут быть изменены без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2013.  
Напечатано в США  
12 сентября 2013 г.  
5991-3068RU



**Agilent Technologies**