

THz spektroskopie pro určování specifických druhů léčiv

Erik Skýpala

Bakalářská práce
2015

 Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: Erik Skýpala
Osobní číslo: A12615
Studijní program: B3902 Inženýrská informatika
Studijní obor: Bezpečnostní technologie, systémy a management
Forma studia: prezenční

Téma práce: THz spektroskopie pro určování specifických druhů léčiv
Téma anglicky: THz Spectroscopy for Identifying Specific Types of Pharmaceuticals

Zásady pro vypracování:

1. Proveďte rešerši o možnostech využití THz spektroskopie.
2. Popište vlastnosti efedrinu/pseudoefedrinu a metamfetaminu.
3. Navrhněte experiment pro snímání vybraných léčiv.
4. Uskutečňte experiment a dané výsledky vhodně analyzujte.
5. Diskutujte získané výsledky.

Rozsah bakalářské práce:

Rozsah příloh:

Forma zpracování bakalářské práce: tištěná/elektronická

Seznam odborné literatury:

1. GAVENDA, Martin. Využití terahertzových frekvencí v bezpečnostních aplikacích. Diplomová práce. Zlín, 2011. Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. Fakulta aplikované informatiky. Vedoucí práce Vojtěch Křesálek.
2. VANČUROVÁ, Lucie. Moderní spektroskopické metody ve forenzní analýze. Diplomová práce. Zlín, 2013. Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. Fakulta aplikované informatiky. Vedoucí práce Hana Vašková.
3. CHAN, Wai Lam, DEIBEL, Jason and MITTLEMAN, Daniel M. Imaging with terahertz radiation. Reports on Progress in Physics 2007, 70, 1325-1379. doi: 10.1088/0034-4885/70/8/R02.
4. INGLE, Latika M. Terahertz spectroscopy for pharmaceutical applications. International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Science Research 2014; 3(1): 48-52.
5. TAYLOR, Zachary D., et al. THz Medical Imaging: in vivo Hydration Sensing. Terahertz Science and Technology, IEEE Transactions on 2011, Vol. 1, Issue 1, 201-219, doi:10.1109/THZ.2011.2159551.

Vedoucí bakalářské práce:

Ing. et Ing. Kateřina Sulovská
Ústav elektroniky a měření

Datum zadání bakalářské práce:

23. února 2016

Termín odevzdání bakalářské práce:

30. května 2016

Ve Zlíně dne 16. února 2016

doc. Mgr. Milan Adámek, Ph.D.
děkan



Ing. Jan Valouch, Ph.D.
ředitel Ústavu

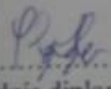
Prohlašuji, že

- beru na vědomí, že odevzdáním diplomové/bakalářské práce souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb. o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších právních předpisů, bez ohledu na výsledek obhajoby;
- beru na vědomí, že diplomová/bakalářská práce bude uložena v elektronické podobě v univerzitním informačním systému dostupná k prezenčnímu nahlédnutí, že jeden výtisk diplomové/bakalářské práce bude uložen v příruční knihovně Fakulty aplikované informatiky Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně a jeden výtisk bude uložen u vedoucího práce;
- byl/a jsem seznámen/a s tím, že na moji diplomovou/bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších právních předpisů, zejm. § 35 odst. 3;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 1 autorského zákona má UTB ve Zlíně právo na uzavření licenční smlouvy o užití školního díla v rozsahu § 12 odst. 4 autorského zákona;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 2 a 3 autorského zákona mohu užit své dílo – diplomovou/bakalářskou práci nebo poskytnout licenci k jejímu využití jen připouští-li tak licenční smlouva uzavřená mezi mnou a Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně s tím, že vyrovnání případného přiměřeného příspěvku na úhradu nákladů, které byly Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše) bude rovněž předmětem této licenční smlouvy;
- beru na vědomí, že pokud bylo k vypracování diplomové/bakalářské práce využito softwaru poskytnutého Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně nebo jinými subjekty pouze ke studijním a výzkumným účelům (tedy pouze k nekomerčnímu využití), nelze výsledky diplomové/bakalářské práce využít ke komerčním účelům;
- beru na vědomí, že pokud je výstupem diplomové/bakalářské práce jakýkoliv softwarový produkt, považují se za součást práce rovněž i zdrojové kódy, popř. soubory, ze kterých se projekt skládá. Neodevzdání této součásti může být důvodem k neobhájení práce.

Prohlašuji,

- že jsem na diplomové/bakalářské práci pracoval samostatně a použitou literaturu jsem citoval. V případě publikace výsledků budu uveden jako spoluautor.
- že odevzdaná verze diplomové práce a verze elektronická nahraná do IS/STAG jsou totožné.

Ve Zlíně, 30. 5. 2016


.....
podpis diplomanta

ABSTRAKT

THz spektroskopie je relativně mladá spektroskopická metoda k určování druhů sloučenin, materiálů, optických a dalších vlastností zvolených materiálů nebo látek. Až nedávné (90. léta 20. století) objevy a inovace v oblasti fotoniky a nanotechnologií vedly k dramatickému vzrůstu zájmu vědecké obce i průmyslových podniků o THz výzkum a aplikace. Bakalářská práce se zabývá využitím terahertzové spektroskopie pro rozpoznávání specifických druhů léčiv, v tomto případě léčiv, z jejichž komponent mohou být vyráběny drogy. Práce je zaměřená na analýzu několika druhů léčiv s obsahem efedrinu/pseudoefedrinu, z nichž se dá vytvořit jedna z nejznámějších syntetických drog, krystalický metamfetamin.

Klíčová slova: Terahertzová spektroskopie, terahertzové záření, pseudoefedrin, metamfetamin, drogy, léčiva

ABSTRACT

THz spectroscopy is a young spectroscopy method used for determination of compound varieties, materials, optical and other material or substances attributes. Discoveries and innovations in photonics and nanotechnologies during nineties of a previous century led to dramatic increase in interest of scientific communities and industrial companies for THz research and applications. The bachelor thesis is concerning application of terahertz spectroscopy for detection of specific medicines, in this particular case medicine which can serve as a drug production component. The thesis focuses on analysis of several medications containing ephedrine/pseudoephedrine, which one of the most famous synthetic drug, crystalline methamphetamine can be created from.

Keywords: Terahertz spectroscopy, Terahertz radiation, pseudoephedrine, methamphetamine, drugs, pharmaceuticals

Poděkování

Tímto bych chtěl poděkovat vedoucí mé bakalářské práce Ing. et Ing. Kateřine Sulovské za její ochotu vést moji bakalářskou práci, za nabídnutou pomoc při řešení jak experimentu psaní bakalářské práce a odborné rady.

OBSAH

ÚVOD	9
I TEORETICKÁ ČÁST	10
1 TERAHERTZOVÁ SPEKTROSKOPIE	11
1.1 ZDROJE A GENEROVÁNÍ THZ ZÁŘENÍ.....	11
1.1.1 Optická rektifikace	11
1.1.2 Směšování rozdílných frekvencí (DFG)	12
1.1.3 Frekvenční multiplikování mikrovln	13
1.1.4 Omezení Terahertzových zdrojů	13
1.2 TPS SPECTRA 3000	14
1.3 ATR	16
1.4 VYUŽITÍ THZ SPEKTROSKOPIE	17
1.4.1 Farmaceutické a jiné výrobní využití	17
1.4.2 Zdravotnictví a využitelnost THz.....	17
1.4.3 Využití THz v bezpečnostních aplikacích	19
2 METAMFETAMIN, PSEUDOEFEDRIN A EFEDRIN	21
2.1 METAMFETAMIN	21
2.1.1 Výroba metamfetaminu	21
2.1.2 Účinky metamfetaminu.....	22
2.2 PSEUDOEFEDRIN A EFEDRIN	22
2.3 DNEŠNÍ SITUACE NA NELEGÁLNÍM TRHU S METAMFETAMINEM.....	24
II PRAKTICKÁ ČÁST	25
3 CÍLE PRÁCE	26
4 EXPERIMENT.....	27
4.1 PŘÍPRAVA VZORKŮ	27
4.2 PŘÍPRAVA K MĚŘENÍ.....	27
4.3 MĚŘÍCÍ METODY.....	28
4.3.1 ATR spektroskopie	28
4.3.2 Transmisní spektroskopie	28
5 MĚŘENÍ.....	29
5.1 MĚŘENÍ ZÁVISLOSTI TLOUŠŤKY VZORKU NA MĚŘENÍ	29
5.1.1 Příprava vzorků pro transmisní spektroskopii.....	29
5.1.2 Měření ATR spektroskopii.....	30
5.1.3 Měření transmisní spektroskopii	32
5.2 MĚŘENÍ LÉKŮ.....	33
5.2.1 Měření léčiv transmisní spektroskopii.....	33
5.2.2 Měření léčiv ATR spektroskopii	36
6 DISKUZE VÝSLEDKŮ	39
ZÁVĚR	40
SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	41
SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK.....	43
SEZNAM OBRÁZKŮ	44

SEZNAM TABULEK	45
SEZNAM GRAFŮ.....	46

ÚVOD

Terahertzová spektroskopie v posledních letech zaznamenala velký rozvoj a to především v bezpečnostních technologiích. Materiály různě reagují na terahertzové záření, více či méně ho odraží a absorbují. Na základě vyhodnocení absorbování či odražení záření můžeme určit, o jakou látku se jedná. Nebezpečné látky jako jsou drogy, výbušniny a dále zbraně lze pomocí této metody detekovat, neboť tyto látky mají specifický otisk v oblasti terahertzového záření. Terahertzové vlny pronikají skrz látky, jako jsou textilie a papír, lze tedy této metody použít pro bezpečnostní kontroly osob. Terahertzová spektroskopie se stále vyvíjí a její využití by mohlo mít na trhu místo v budoucnu.

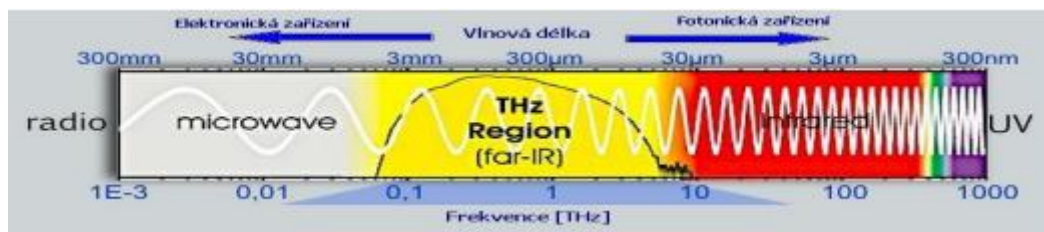
V další části se práce zabývá problematikou spojenou s metamfetaminem. Metamfetamin patří k nejrozšířenějším drogám v ČR a Evropě. Původně se používal k výrobě léků, poté byl však zakázán. Metamfetamin se vyrábí z léků obsahující pseudoefedrin/efedrin. Tyto léčiva jsou dostupné v každé lékárně. Výroba metamfetaminu je poměrně jednoduchá a materiály potřebné k výrobě jsou snadno dostupné, proto je droga tak rozšířená. Pseudoefedrin/efedrin je využíván ke zmírnění průběhu chřipky a alergií má uklidňující účinky.

V praktické části byly zkoumány vlastnosti léčiv obsahující pseudoefedrin/efedrin využívané k výrobě metamfetaminu. Bylo použito dvou metod měření, první metodou byla metoda ATR spektroskopie, druhou transmisní spektroskopie. V rámci experimentu bylo provedeno měření závislosti tloušťky vzorku na naměřená data. Bylo měřeno na zařízení TPS Spectra 3000.

I. TEORETICKÁ ČÁST

1 TERAHERTZOVÁ SPEKTROSKOPIE

Terahertzová spektroskopie je experimentální metoda zabývající se studiem vzorků látek využívající pro měření vzorků Terahertzové záření. Terahertzové záření se nachází v oblasti elektromagnetického spektra mezi mikrovlnným a infračerveným zářením. Oblast Terahertzové záření pracuje v pásmu o frekvenci 0,1 THz -10 THz, vlnová délka se zde pohybuje v rozmezí mezi 30 μm a 3 mm. Dříve tato oblast spektra byla nevyužívaná z důvodů nedostatečného vybavení. Kolem roku 1990 začaly probíhat první výzkumy, jelikož v té době již byly vynalezeny generátory a detektory Terahertzového záření. Díky tomu že Terahertzová spektroskopie proniká pouze s nepatrným zeslabením běžnými materiály, jako jsou papír, umělá hmota, textilie nebo dřevo má tato metoda má využití v mnoha odvětvích například v lékařství, bezpečnostních technologiích, v průmyslových aplikacích a různých zobrazovacích zařízeních. [1,2]



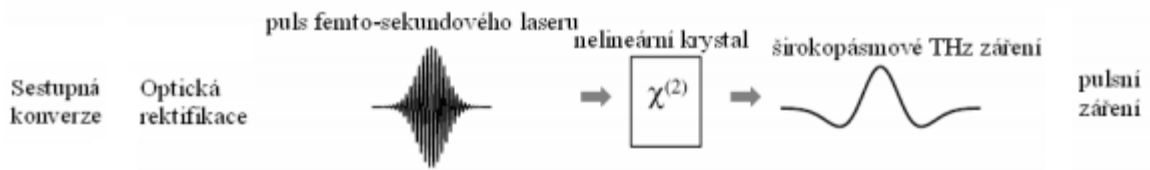
Obr. 1 THz spektrum [2]

1.1 Zdroje a generování THz záření

Zdroje pro vytvoření Terahertzového záření používají principy vytváření záření z oblasti mikrovlnného záření anebo z druhé strany pomocí infračerveného záření.

1.1.1 Optická rektifikace

Optická rektifikace je proces vytvářející THz foton ze dvou optických fotonů o frekvenci f_1 a f_2 v nelineárním krystalu, výsledný THz foton má frekvenci $f=f_1 - f_2$. Optická rektifikace používá ultrakrátkých femtosekundových (10^{-15} s) laserových pulsů. Po průchodu nelineárního krystalu vznikají širokopásmové THz pulsy, které mají podobný tvar jako laserové pulsy z laseru. [3]



Obr. 2 Optická rektifikace [3]

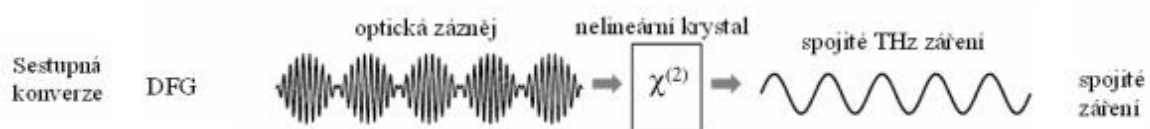
Z důvodu generování THz pomocí optické rektifikace, která může nastat v různých materiálech je nezbytné rozlišovat mezi různými způsoby generování záření.

1. *“Při tak vysoké energii fotonů, že fotony dosáhly vodivé sféry v nelineárním materiálu. Fotony se uvolní z valenční sféry, což zapříčiní vyzáření volných nosičů, a nelineární koeficient susceptibility dosáhne nejvyšší možné hodnoty; tím dochází k zesílení rezonance. Tento typ optické rektifikace vede ke generování THz záření v materiálech, jako jsou polarizované polovodiče – jmenovitě GaAs nebo CdTe při buzení titan-safírovým laserem s vlnovou délkou 800 nm.”* [3]

2. *“Při tak nízké energii fotonů, že nedosáhnou vodivé sféry. Dojde pouze k vytvoření neharmonických potenciálů nosičů (virtuální přechod) a velmi důležitou se stává podmínka fázového synchronismu. Tento stav je obvykle charakterizován zářením, které lze popsat jako rozdíl mezi indexem lomu svazku optických pulzů a indexem lomu THz frekvencí. Typickým příkladem materiálů, u kterých je změna nerezonantní, a doznívající stav téměř mizí kvůli budicímu záření o vlnové délce blízké k 800 nm je ZnTe. V tomto materiálu je efektivita optické rektifikace limitována procesem dvoufotonové absorpce, která při vysokých budicích intenzitách není zanedbatelná.”* [3]

1.1.2 Směšování rozdílných frekvencí (DFG)

Podobná metoda jako optická rektifikace ovšem místo fotonů jsou vyslány dvě spojitě optické vlny, které po průchodu nelineárním krystalem vytvářejí spojitě THz záření. Také zde platí, že frekvence výsledného záření f je rozdílem obou frekvencí optických vln, tedy $f = f_1 - f_2$. Nejúčinnější krystal pro generování THz metodou DFG je sloučenina GaAs. S ostat-



Obr. 3 Směšování rozdílných frekvencí (DFG) [3]

ními materiály pro nelineární krystal jako jsou LiNbO_3 , GaP a DAST bylo také vyzařování THz dosaženo, ovšem tyto materiály nemají takovou účinnost a efektivitu. [3]

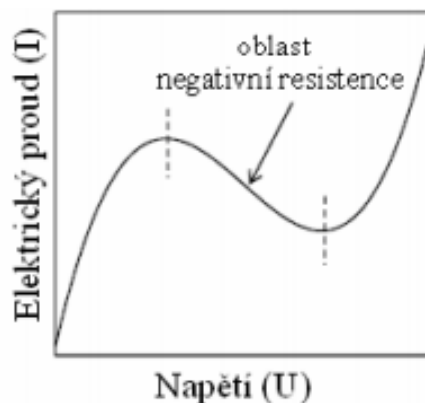
1.1.3 Frekvenční multiplikování mikrovln

Další z metod vytváření THz záření pomocí polovodičů, je úzce spojena s mikrovlnnými technologiemi. Jako vstupní signál jsou přivedeny mikrovlny ve frekvenčním rozsahu od 10 GHz do 100 GHz, pomocí Schottkyho diody je upravena frekvence mikrovln. [3]



Obr. 4 Frekvenční multiplikování mikrovln [3]

Jako mikrovlnné polovodičové zdroje jsou používány Gunn diody a tunelové diody. Při připojení na rezonátor mění stejnosměrný elektrický signál na střídavý signál, tento signál má pak frekvenci v pásmu mikrovln. Důležitou vlastností, kterou mají generované vlny je negativní rezistence. Tuto vlastnost lze vidět na VA charakteristice Gunn diody (Obr. 5).



Obr. 5 VA charakteristika
Gunn diody [3]

1.1.4 Omezení Terahertzových zdrojů

Hlavním problémem jsou omezení související s vlastnostmi používaných materiálů. Zdroje využívající polovodičové komponenty (oscilátory, zesilovače) a ty jsou limitovány časem přenosu, který vyvolává fázový posun záření. Zdroje generující Terahertzové záření pomocí fotonů pracují s velkou energií a dochází k zahřívání. Proto je nutné při použití této me-

tody mít chlazení tekutým heliem. Zdroje vytvářející Terahertzové záření jsou velmi závislé na rozměrech. Výkonné zdroje vytvářející silné Terahertzové záření jsou příliš velké a nevhodné pro praktické využití. Prakticky přijatelnější zdroje jsou ovšem méně výkonné a vytvářejí méně intenzivní záření. Nedílnou součástí omezující používání Terahertzové spektroskopie je cena přístrojů, která je z důvodu použití některých technologií, velikosti energetické ztráty při vytváření záření a chlazení na optimální pracovní teplotu přístroje velmi drahá. [1]

1.2 TPS Spectra 3000

Přístroj TPS Spectra 3000 je pulzní spektrometr, který generuje THz záření v rozsahu od 0,06 THz do 4 THz ($2 \text{ cm}^{-1} - 120 \text{ cm}^{-1}$). Je užíván k výzkumu a zkoumání rozličných materiálů. Jelikož může pracovat při pokojových teplotách není náročný na provoz ani na údržbu. Mechanická stabilita je zvyšována ručním montováním všech optických komponent, které vyžadují pouze každodenní seřízení. TPS Spectra 3000 se před měřením musí stabilizovat, což zabere přibližně 30 minut. Před měřením je potřeba ještě nechat nahřát laser, tento proces trvá přibližně 45 minut. Tuto dobu je nutné nechat laser opět i vychladnout po dokončení měření. Přístroj vyhodnotí naměřené hodnoty a vypočítané výsledky zapíše do textového souboru. Pro měření byly důležité veličiny absorbance a index lomu. [4]



Obr. 6 Přístroj TPS spectra
3000 [4]

Vzorce použité pro výpočty:

$$T = \frac{I_v}{I_b} \quad (1)$$

Transmitance je množství světla, které projde vzorkem je dána vzorcem, kde transmitance T je dána podílem intenzity záření prošlé vzorkem I_v a intenzity záření prošlé slepým vzorkem I_b .

$$A = -\log T = \log \left(\frac{1}{T} \right) \quad (2)$$

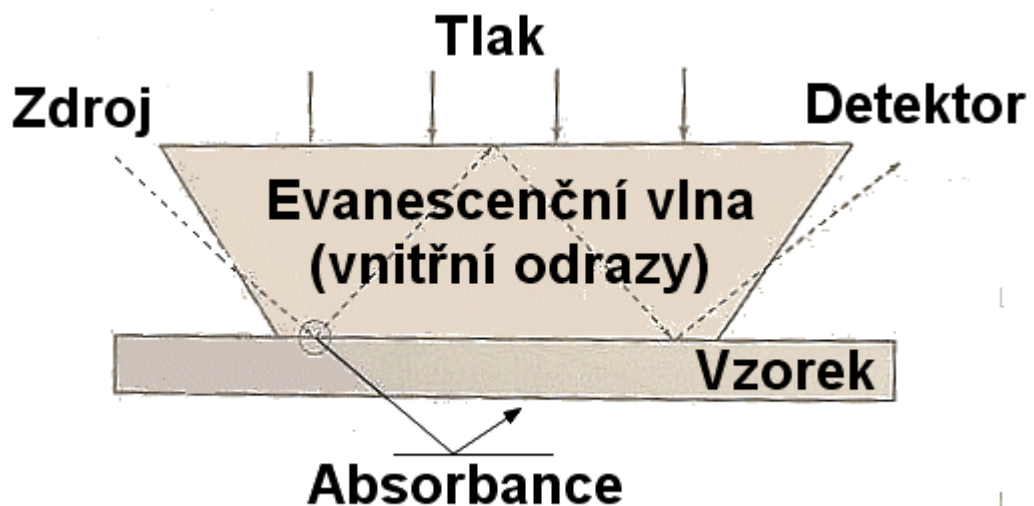
Absorbanci neboli množství světla pohlcené vzorkem vypočítáme dle vzorce, kde absorbanci A vypočítáme pomocí transmitance T .

$$n = \frac{c}{v} \quad (3)$$

Index zlomu n je dán podílem rychlosti světla ve vakuu c a rychlosti světla v dané látce.

1.3 ATR

Tento postup měření je určen k měření tekutých vzorků, gelů a prášků. Z důvodu plného kontaktu mezi pevnou látkou a krystalem není třeba mít vzorek drcen ani nijak upravován. Metoda ATR využívá reflexe THz záření při průchodu ATR krystalem. Krystaly jsou optické hranoly s velkým indexem lomu. K výrobě těchto hranolů se používají materiály germanium, křemík, ZnS, ThBr nebo ZnSe. Vzorky jsou umísťovány do přímého kontaktu s ATR krystalem. Na hranici zkoumaného vzorku a ATR krystalu vznikne absorpční vlna, ta se s vzrůstající vzdáleností od hranice mezi oběma materiály exponenciálně klesá. Proto vytvoříme mírný tlak a stlačíme vzorek a krystal k sobě. [1,5]



Obr. 7 Princip ATR [5]

ATR metoda je ovlivňována několika aspekty měření:

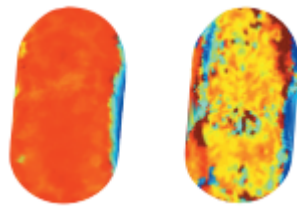
- vlnová délka THz záření – ovlivňuje hloubku průniku záření,
- index lomu krystalu – úhel dopadu záření musí být menší nebo roven meznímu úhlu,
- tvar krystalu – ovlivňuje průchod paprsku a počet odrazů,
- materiál krystalu – ovlivňuje index lomu a spektrum propustnosti THz záření,
- úhel dopadu – má vliv na počet odrazů v krystalu a hloubku průniku,
- kontakt vzorku s krystalem – nejlépe splňují kapalné a plastické materiály,
- hloubka průniku záření. [6]

1.4 Využití THz spektroskopie

THz spektroskopie je zatím využívána zatím hlavně k vědeckým účelům než používána přímo v komerčním měřítku. Mezi hlavní obory zabývající se a používající THz spektroskopii patří bezpečnostní systémy, zdravotnictví a výzkumu. THz záření nepoškozuje zkoumané materiály a nemělo by mít žádné negativní vlivy ani na lidské tkáně vystavené tomuto záření. Nemá problémy s prostupností nevodivými materiály jako je oblečení, papír dřevo. Naopak záření neprostoupí kovy ani vodou.

1.4.1 Farmaceutické a jiné výrobní využití

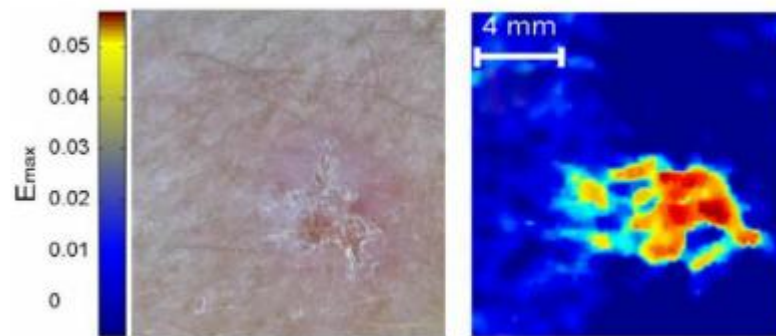
Farmaceutické využití má hned několik podob a v několika fázích přípravy léku a jiných výrobků. Složení výrobku, měření hustoty a hloubky povlaku, zjišťování rozpustnosti a plánovat uvolňování léku v lidském těle, doladování a kontrola kvality a jeho celistvost to jsou hlavní využití v oblasti výroby. Rozdíl nerovnoměrnost povlaku můžeme vidět na obrázku (Obr. 8), kde pilulka vpravo má jednoznačně nerovnoměrné složení povrchu. [4]



Obr. 8 Porovnání
povrchů léků [4]

1.4.2 Zdravotnictví a využitelnost THz

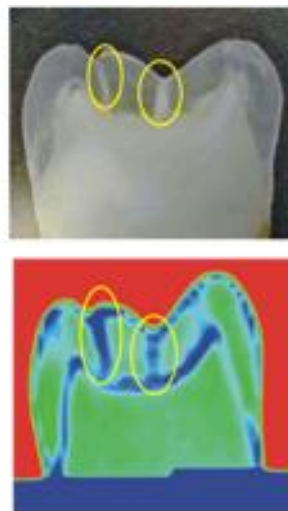
Velký potenciál má THz zobrazování ve zdravotnictví. Nejčastější využití THz záření je spojeno s rakovinou a s kůží. Jelikož THz záření neprochází vodou lze dosáhnout pouze povrchových měření. Metoda spočívá v detekci a označení zasaženého místa rakovinou, obzvláště rakovinu kůže. Zdravá tkáň totiž jinak absorbuje THz záření než tkáň postižená rakovinou. Ovšem tato vyšetření jsou drahá a stále ve výzkumu. Na obrázku lze vidět kůži viditelnou lidským okem a kůži zobrazenou pomocí THz zobrazení. Na obrázku (Obr. 9) lze vidět, že existují místa zasažena rakovinou a přesto nejdou vidět pouhým okem. [4]



Obr. 9 Lidská kůže pozorována lidským okem (vlevo) a THz zobrazením (vpravo) [4]

Za další využití ve zdravotnictví lze považovat schopnost THz záření sledovat erozi skloviny na povrchu zubu a detekovat zubní kaz. Rentgeny, které se používají nyní v největší míře, odhalují problém až v pozdních fázích a je nutno zub vrtat a plombovat. Pokud by ovšem zubní kaz byl detekován dříve, nemuselo by dojít k vrtání.

Na obrázku (Obr. 10) vidíme rozdíl mezi rentgenem zubu a zobrazení pomocí THz záření. Lze vidět, že rozdíl v detailech je zřejmý. [4]

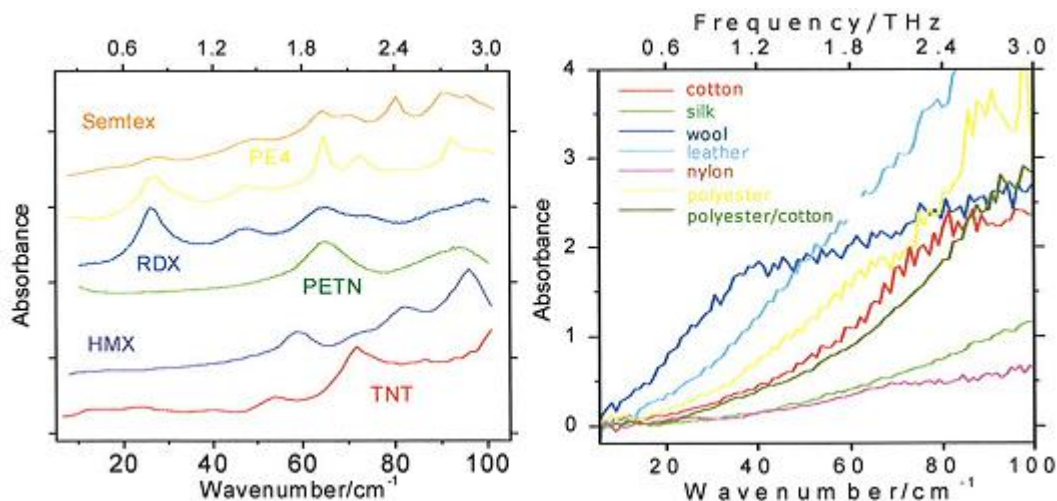


Obr. 10 Detail zubu [4]

1.4.3 Využití THz v bezpečnostních aplikacích

Využití THz záření v bezpečnosti má mnoho podob. Záleží na tom, co přesně od použití přístrojů používající THz záření potřebujeme. Pro dobrou průchodnost materiály jako jsou textilie a jiné nevodivé látky se THz záření používá při kontrole osob a předmětů či zavazadel. Při kontrolách osob a zavazadel je hlavním úkolem detekce skrytých zbraní, výbušnin a drog.

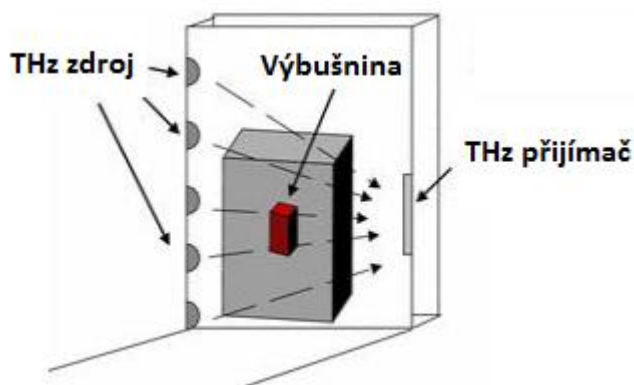
Většina látek, které považujeme za zakázané a nebezpečné jako jsou drogy, výbušniny, skryté zbraně či nože lze pomocí zařízení využívající THz záření detekovat. Tyto látky totiž mají specifické spektrální otisky oproti materiálům, které jsou v normálním provozu přítomny. To lze vypožorovat na obrázku (Obr. 11), kde v levé části vidíme absorpci výbušnin a v pravé straně absorpce materiálů které se používají k výrobě oblečení. [4]



Obr. 11 Příklady THz spekter výbušnin a textilu [4]

Hlavní nevýhodou zařízení detekující výbušniny a zbraně pomocí THz je, že nelze detekovat cokoli uvnitř lidských dutin. A to z důvodu že lidské tělo obsahuje velké množství vody, přes které toto záření neprojde, ovšem cokoli člověk nese na svém těle může být detekováno. [7]

U detekce THz spektroskopii rozlišujeme dva druhy detekce a to detekci na malou vzdálenost a zobrazování ze vzdáleného místa. Detekce na malou vzdálenost je zaměřená spíše na zavazadla a poštu, kde hledá například ukryté výbušniny nebo drogy. Jak lze vidět na obr. 12 zdroj THz záření vyrazuje záření přes balíček ve kterém je uschována výbušnina. Výbušnina absorbuje část záření a THz přijímač spolu se softwarem určeným k detekci pozná, že se jedná o výbušninu a zalarmuje ostrahu nebo učiní jiná bezpečnostní opatření. [1]



Obr. 12 Kontrola zásilek či zavazadel [8]

Druhá varianta a to je detekce ze vzdáleného místa, při které zdroj vysílá záření od prostoru a očekává odraz od látky kterou může detekovat jako nebezpečnou nebo zakázanou. Tento způsob detekce je konkurencí rentgenového záření a to hlavně z důvodu bezpečnosti osob, které nejsou vystavovány tak velkému záření jako v případě rentgenu.[1]

Používání skenerů vadí různým organizacím chránící soukromí lidí. Vadí jim, že skenery mohou vidět detaily lidského těla a bojí se zneužití těchto snímků a podezřívají to za zásah do soukromí cestujících. Proto musely být vytvořena jasná pravidla chránící soukromí a posléze i snímky. Mezi hlavní metody zajištění soukromí patří vzdálený terminál, na kterém jsou snímky vyhodnocovány, a tudíž obsluha terminálu nevidí obličej cestujícího. Dále snímky, které jsou nasnímány, mohou být promítnuty jen důležité informace na univerzální model člověka, na kterém se promítne místo kde by se měly zakázané látky vyskytovat, popřípadě může být obličej daného zákazníka ještě před kontrolou rozmazán.[9]

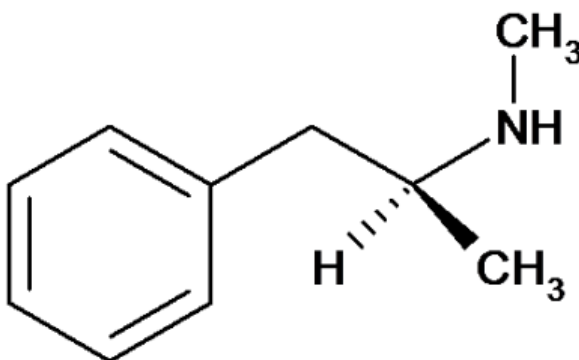


Obr. 13 Detekce výbušnin pomocí odrazu [8]

2 METAMFETAMIN, PSEUDOEFEDRIN A EFEDRIN

2.1 Metamfetamin

Metamfetamin je pravděpodobně jeden z nejvíce rozšířených syntetických stimulantů a je úzce spojen s amfetaminem. Také zabírá druhé místo v rozšířenosti na světě hned po marihuaně. Poprvé byl syntetizován v Japonsku v 90. letech 19. století z efedrinu, od té doby si prošel již několika změnami. Původně byl používán jako lék, následně byl používán jako stimulant a jako látka zvyšující výkon vojáků za druhé světové války a ve válce ve Vietnamu. Tehdy byl tento lék ještě legální a byl hojně užíván a předepisován. V 70. letech byl v USA metamfetamin zakázán, u nás byl hojně nelegálně vyráběn. V současné době má i terapeutické využití, ale většina metamfetaminu vyráběná na světě je nelegální a je vyráběna kvůli zisku z prodeje. [10, 11]

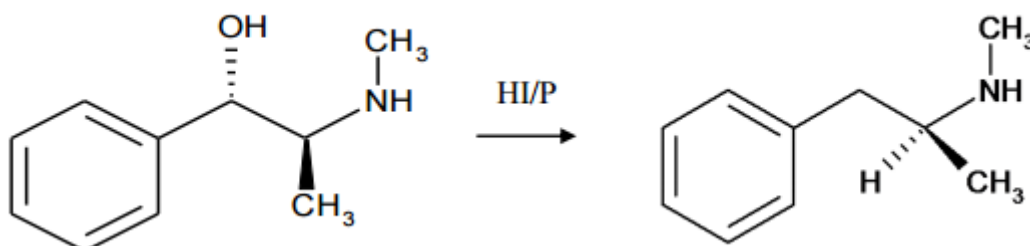


Obr. 14 Strukturní vzorec metamfetaminu
[12]

2.1.1 Výroba metamfetaminu

Nelegální metamfetamin se nejčastěji vyrábí z efedrinu nebo pseudoefedrinu či benzylmethylketonu (ten se spíše využívá pro výrobu amfetaminu). Metamfetamin se většinou na rozdíl od svých prekurzorů a jiných drog vyrábí poblíž místa spotřeby. Proto se výrobní a distributoři těžce hledají a odpovídá tomu i počet zadržovaných kilogramů metamfetaminu. Výroba metamfetaminu není obtížná a dá se lépe utajit, přestěhovat nebo podle situace jednorázově použít a pak zase rozložit a převést. Dostupnost prekurzorů obsahující efedrin/pseudoefedrin pro výrobu metamfetaminu je sice omezena na předpis, ale jinak jsou prodejné v každé lékárně. Efedrin a pseudoefedrin se vyrábí extrakcí z rostliny jménem Chvojník čínský nebo chemickou syntézou. Při velkém prodeji těchto látek je nutná mezinárodní kontrola prodeje. Další prekurzory jsou červený fosfor, kyselina fosforečná a

kyselina jodovodíková. Tyto chemikálie sice nejsou volně prodejné, ale nejsou nedostupné. K výrobě stačí základní laboratorní vybavení: baňky, odměrný válec, chladič, odpařovací mísa, kádinky, váha a teploměr. Vařič je schopen drogu vyrobit za velmi krátkou dobu pohybující se od 30 minut výše, závisí přitom na množství, použitém receptu a zkušenosti vaříče.



Obr. 15 Chemická reakce při výrobě metamfetaminu z efedrinu [12]

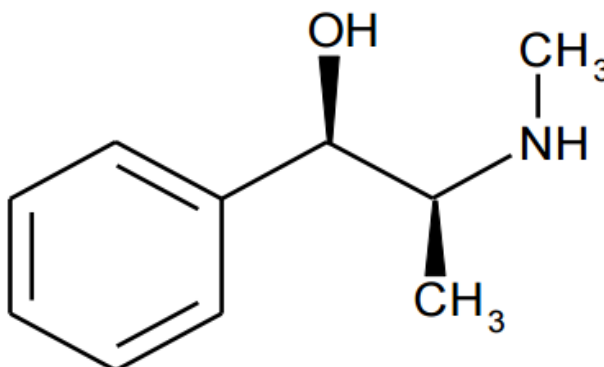
2.1.2 Účinky metamfetaminu

Metamfetamin působí na mozek s psychostimulačními účinky, tyto účinky se projevují pocitem síly, výkonnosti a zvýšením sebevědomí. Zahání pocit únavy, hladu, ospalosti, zrychluje reakce a vnímavost. Látka vyvolává pocit dobré nálady a pohody a to jak po fyzické tak i po duševní stránce. Při opakovaném podávání stimulantu dochází ke zmírnění jeho účinnosti a k nutnosti zvýšení dávky nebo zvýšení frekvence dávkování. Dochází k psychické závislosti a takto závislý člověk chce pořád další a další dávku. Časem závislost a podávání drog vyústí k rozvratu člověka, po stránce pracovní morální i společenské. Dopady používání metamfetaminu jsou opačného charakteru než pocity vyvolané užitím drogy. Jedná se o halucinace, paranoiu, bludy, sebevražedné sklony, agresivita, deprese. Poškození mozku, jater, ledvin, plic, krevního oběhu, podvýživa, infekční nemoci při aplikaci injekčně. [10]

2.2 Pseudoefedrin a efedrin

Obě látky jsou si velice blízké a to jednak strukturou a složením, ale i účinky. Pseudoefedrin je využíván více než efedrin a to jak v lékařství, tak k výrobě drog. Hlavní výhodou pseudoefedrinu jsou jeho mírnější účinky na centrální nervový systém a vyvolává také méně nežádoucích účinků. Pseudoefedrin je v lékařství používán k výrobě léků proti chřipce a nachlazení zejména ho obsahují léky Modafen, Aspirin komplex. Paralen plus, Nurofen Stopgrip. Všechny tři léky obsahují stejné množství pseudoefedrinu 30mg/tabletu. Pseudo-

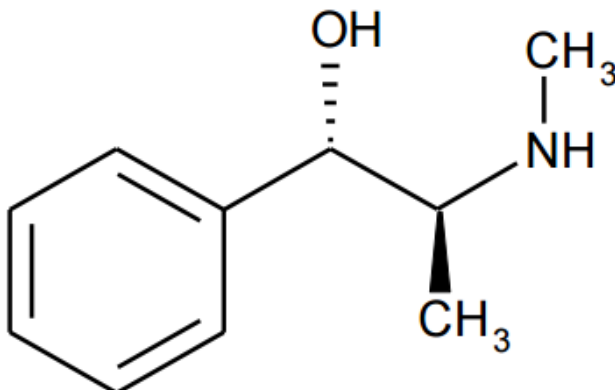
efedrin se využívá k výrobě těchto léků zejména kvůli tlumení bolesti, tlumí kašel, zmírňuje horečku a snižuje otok horních cest dýchacích. Mezi další léky využívající pseudoefedrin je Disophol repetabs a Clarinase repetabs jedná se o léky zmírňující dopady alergie, senné rýmy a zánětu nosohltanu a nosních cest a obsahují zvýšené množství pseudoefedrinu 120mg/tabletu. Pseudoefedrin zde působí jako látka zmírňující otok a překrvení nosních sliznic a uvolňuje dýchací cesty, dalším lékem s množstvím 120mg/tabletu je Aerinaze.



Obr. 17 Strukturální vzorec pseudoefedrinu

[12]

Mezi odlišné léky patří Ephedrin biotika, injekční roztok kdy jedna 1ml ampule obsahuje 50mg efedrinu. Efedrin je rychle rozveden především do jater, ledvin, sleziny, a mozku. Biologický poločas je přibližně 3 – 6 hodin a v této době tělo vyloučí močí 60 - 80% efedrinu a do 24 hodin se vyloučí 95% podané dávky. Tento lék se používá sklonu ke krátkodobým ztrátám vědomí či upadání do krátkodobého spánku během dne proti své vůli. [12,13]



Obr. 16 Strukturální vzorec efedrinu [12]

Na příbalových letácích každého léku obsahující pseudoefedrin/efedrin je popsáno velké množství situací ve kterých by se tyto léky neměly užívat. Mezi hlavní situace, kdy nepoužívat léky s pseudoefedrinem/efedrinem, patří samozřejmě přecitlivělá až alergická reakce na obě tyto léčivé látky, při hyperfunkci štítné žlázy, dále problémy krvetvorby a srážení krve, při cukrovce a je zakázáno ho užívat v těhotenství a při kojení. Na lécích obsahující pseudoefedrin/efedrin si lze při nadměrném používání či dlouhodobém užívání vytvořit závislost, tudíž se doporučuje po 7 dnech užívání léku a nedostavení se zlepšení kontaktovat lékaře nebo lékárníka.[12,13]

Nežádoucí účinky u těchto léků jsou velmi podobné, patří mezi ně: neklid, nespavost, svalová slabost, nevolnost, třes, bušení srdce, halucinace a bludy, poruchy močení, problémy v trávicím traktu, pálení žáhy a závratě, bolest hlavy. Procentuální výskyt nežádoucích účinků je u každého léku různý, ale pohybuje se od 5% do 10% pacientů užívající léky, ovšem nejvíce zastoupeny jsou bolesti hlavy, zvracení a pálení žáhy, tedy žádné větší ohrožení. [13]

2.3 Dnešní situace na nelegálním trhu s metamfetaminem

Odhady užívání v Evropské unii jsou následující. K roku 2014 se předpokládá že 11,4 milionů dospělých užilo drogu a 1,5 milionu jí užilo za poslední rok. Obavy z metamfetaminu rostou a to z důvodů dostupnosti a rozšířenosti užívání metamfetaminu. Užívání metamfetaminu bylo dříve rozšířeno především na územích České republiky a Slovenska, nyní se rozšiřuje do Německa a dále do Řecka, Turecka a na Kypr. Národní monitorovací středisko pro drogy a drogové závislosti odhaduje, že se v České republice vyrobí ročně okolo 6 tun metamfetaminu, s tohoto množství pár desítek kilogramů zabaví Česká policie. Mezi hlavní řešení jak omezit výrobu metamfetaminu patří omezit volný prodej léků v Polsku, ze kterých se metamfetamin vyrábí a omezit jejich dovoz do ČR. [10]

II. PRAKTICKÁ ČÁST

3 CÍLE PRÁCE

Cílem práce je:

- Seznámení s technologií THz záření,
- Rozebrání účinku a vlastností metamfetaminu, pseudoefedrinu a efedrinu
- Navrhnout a provést experiment pro snímání THz spekter léčiv

4 EXPERIMENT

4.1 Příprava vzorků

K experimentu bylo vybráno 6 různých vzorků. Vzorky měly podobu potahovaných tablet a byly použity komerčně používané léky. Každá tableta byla rozdrčena v hmoždíři a poté byla pomocí inertního lepidla nanášena na papír. Inertní lepidlo a papír je u všech vzorků stejné, byl tedy naměřen jako referenční vzorek. U přípravy vzorků bylo nutné dbát na stejnoměrnou vrstvu prášku, který byl lepen na papír. Další sadu vzorků tvořila čistá jedlá soda, u které jsme měřili vliv tloušťky vzorku na získaném spektru.

Tab. 1 Seznam vybraných léčiv

číslo vzorku	Lečivo
1	Clarinase
2	Clarinase prošlý
3	Aspirin complex
4	Modafen 24
5	Clarinase prošlý
6	Paralen plus
0	slepý vzorek na spárování

Příprava pro měření ATR byla o poznání jednodušší, prášky byly nanášeny přímo na ATR krystal a zaletovány, následně došlo k měření.

4.2 Příprava k měření

Před měření bylo nutné připravit přístroj TSP Spectra 3000 do kalibrovaného stavu. Po kalibraci přístroje a zahřátí laseru bylo nutné nastavit parametry měření v aplikaci softwaru ovládající přístroj. Byly nastavovány parametry měření rozsah THz spektra a frekvence snímání. A byl připraven ATR modul, který se připevňuje k přístroji externě.

Před začátkem byly nastaveny parametry:

- Rozlišení – nastaveno na hodnotu $1,2 \text{ cm}^{-1}$
- Počet skenů – počet průchodů signálu vzorkem. Pro měření bylo nastaveno 30 skenů.
- Skenování frekvence – Pro měření bylo nastaveno 30Hz.

4.3 Měřicí metody

4.3.1 ATR spektroskopie

ATR modul byl připojen na přístroj TPS spektra 3000, pevně se upevnil šroubovitými držáky k přístroji. Po pevném upevnění modulu a nastavení softwaru mohlo dojít k samotnému měření. Vzorky byly postupně vkládány a pomocí tlakového mechanismu přitlačeny ke krystalu, aby byl zaručen kontakt přímo s ATR krystalem. Následně mohlo dojít k měření vzorku. Hlavní výhodou této metody zůstávají nízké nároky na přípravu vzorků, vzorky lze měřit téměř bez přípravy.



Obr. 18 ART modul [4]

4.3.2 Transmisní spektroskopie

Pro měření transmisní spektroskopii musel být odmontován ATR modul a při měření byl přidělán kryt. Do držáků byl umístěn vzorek, držáky udržují vzorek v pozici tak, aby jím záření procházelo.



Obr. 19 Měřicí prostor u transmise v přístroji TPS spectra 3000 [4]

5 MĚŘENÍ

5.1 Měření závislosti tloušťky vzorku na měření

K měření byla vybrána jedlá soda, která byla měřena jak ATR spektroskopií tak metodou transmisní spektroskopií. Byla vybrána kvůli homogenosti vzorku, což je nutná vlastnost pro měření dopadu tloušťky na výsledky měření, bylo potřeba mít vzorek homogenní kvůli vyvrácení výskytu látek, které by ovlivňovaly naměřené THz spektra. Další velkou výhodou byla sypkost látky, a tedy nám odpadla nutnost prášky drtit. Tudíž byla pouze nalepena na papír pro transmisní spektroskopií a pro ATR metodu jsme si sypali přímo na ATR krystal.

5.1.1 Příprava vzorků pro transmisní spektroskopií

Příprava vzorků s jedlou sodou měla podobný průběh jako příprava vzorků pro měření léků. Jedlá soda byla přilepena inertním lepidlem k papíru, aby mohla být změřena v transmisním režimu. Naměřené tloušťky jsou včetně papíru a lepidla. Tloušťky vzorků byly změřeny po nalepení sody pomocí digitálního mikrometru s přesností 0,001mm. V tabulce (Tab. 2) jsou zapsány tloušťky vzorků pro transmisní spektroskopií

Tab. 2. Tloušťka vzorků

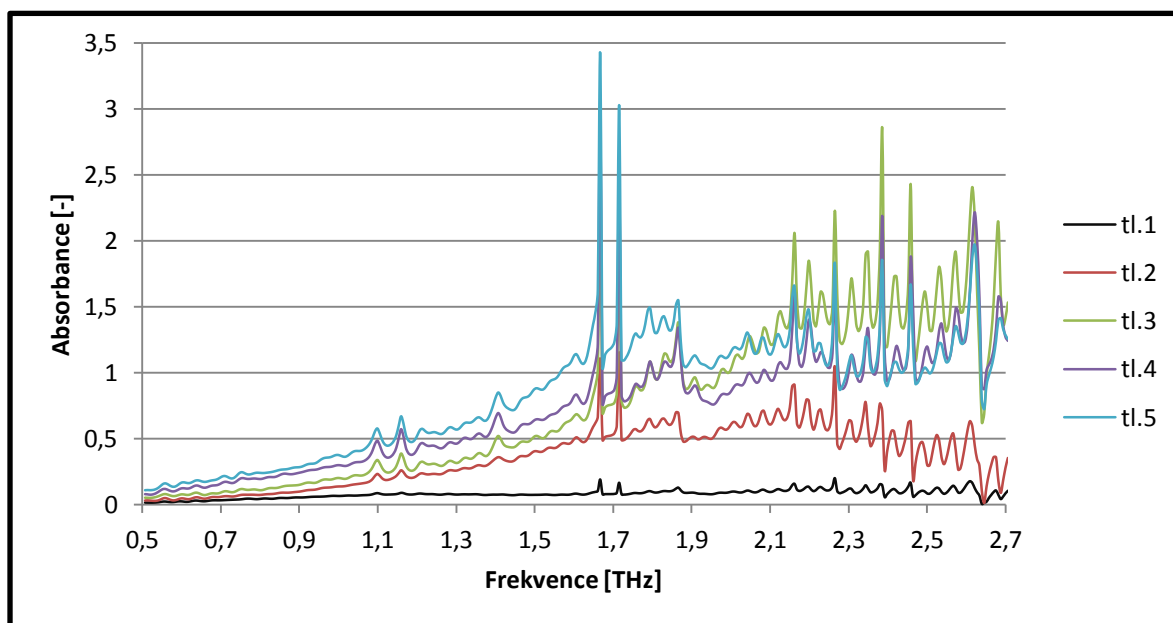
Číslo vzorku	Tloušťka [mm]
vzorek 1	0,356
vzorek 2	0,404
vzorek 3	0,457
vzorek 4	0,510
vzorek 5	0,567

5.1.2 Měření ATR spektroskopií

Při měření jedlé sody i vybraných léčiv ATR spektroskopií bylo postupováno stejně. Vrstva sody byla postupně navyšována a stlačována pomocí tlakového mechanismu. Každý vzorek po přitlačení na krystal byl podroben deseti měřením, výsledky jsou poté zprůměrovány. Tloušťky vzorků jsou uvedeny v tabulce (Tab. 3).

Tab. 3. Tloušťka vzorků

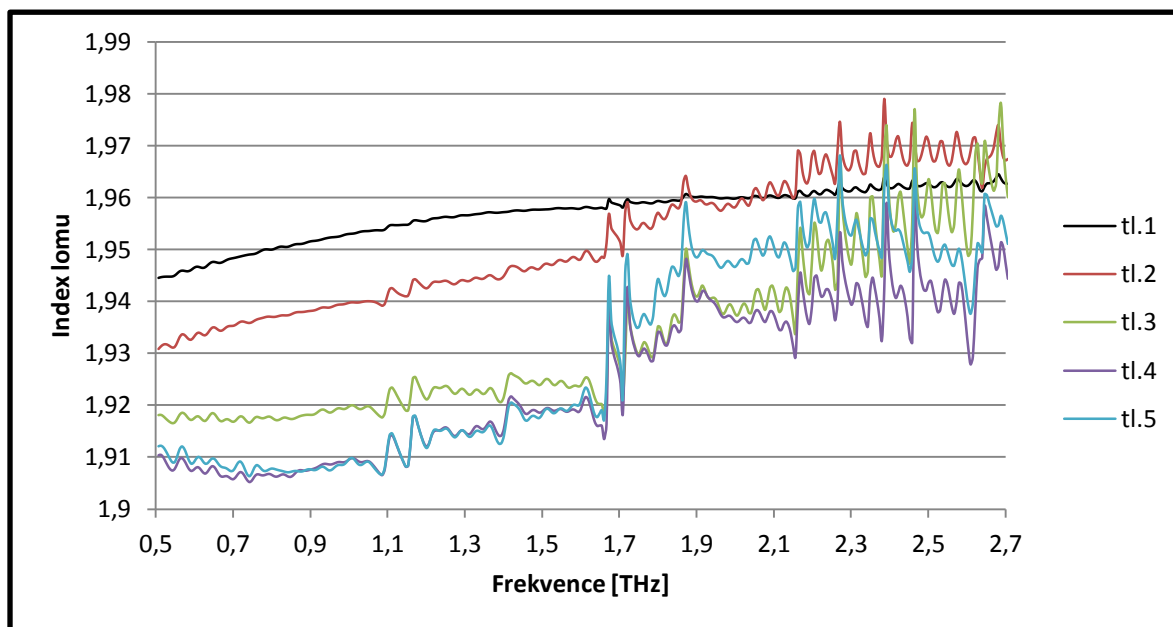
Číslo vzorku	Tloušťka [mm]
vzorek 1	0,353
vzorek 2	0,391
vzorek 3	0,446
vzorek 4	0,514
vzorek 5	0,560



Graf. 1. Absorpce jedlé sody ATR

Graf. 1 nám zobrazuje závislost absorpance na frekvenci záření. Rozsah grafu jsem zvolil od 0,5 THz do 2,7 THz, došlo tím k větší ostrosti grafů a větší přehlednosti. Na grafu lze pozorovat podobné píky u všech měřených vzorků ve stejných frekvencích, kvůli této vlastnosti naměřených hodnot jsme zvolili jednotnou látku. Graf nám zobrazuje menší píky okolo 1,1 THz a 1,4 THz, o mnoho výraznější píky lze pozorovat okolo 1,7 THz. Za hranicí 2,1 THz lze pozorovat nárůst vibrací absorpance a rozdíl mezi jednotlivými spektry s

výjimkou vzorků 1 a 2 nejsou výrazné. Z výsledků tohoto měření vyplývá, že se zvětšující se tloušťkou se absorpance zvětšuje. Dále lze pozorovat, že tloušťka 1 až na píky okolo frekvence 1,7 THz nemá výraznější vibrace do frekvence 2,1 THz poté lze pozorovat menší vibrace.

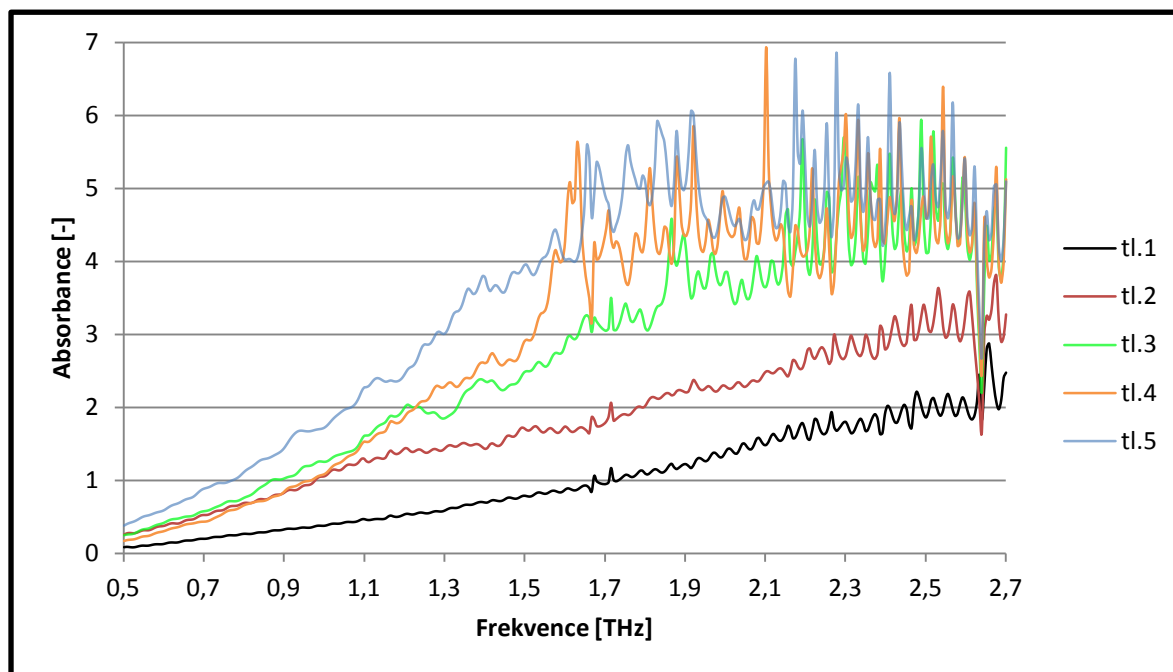


Graf. 2 Index lomu ATR

Z grafu (Graf. 2) lze pozorovat frekvenční závislost indexu lomu mezi krystalem a sodou. Indexy lomu mezi tloušťkou 1 a tloušťkou 2 postupně s navyšováním frekvence rostou, tloušťka 1 stoupá mírněji a tloušťka 2 okolo frekvence 2,2 THz a výše má větší index lomu než tloušťka 1. Tloušťka 4 a tloušťka 5 mají velmi totožný index lomu do frekvence 1,7 THz poté má tloušťka 5 index větší. Po frekvenci 2,1 THz lze vypořadovat větší vibrace indexu lomu a rozmezí mezi jednotlivými tloušťkami se zmenšilo.

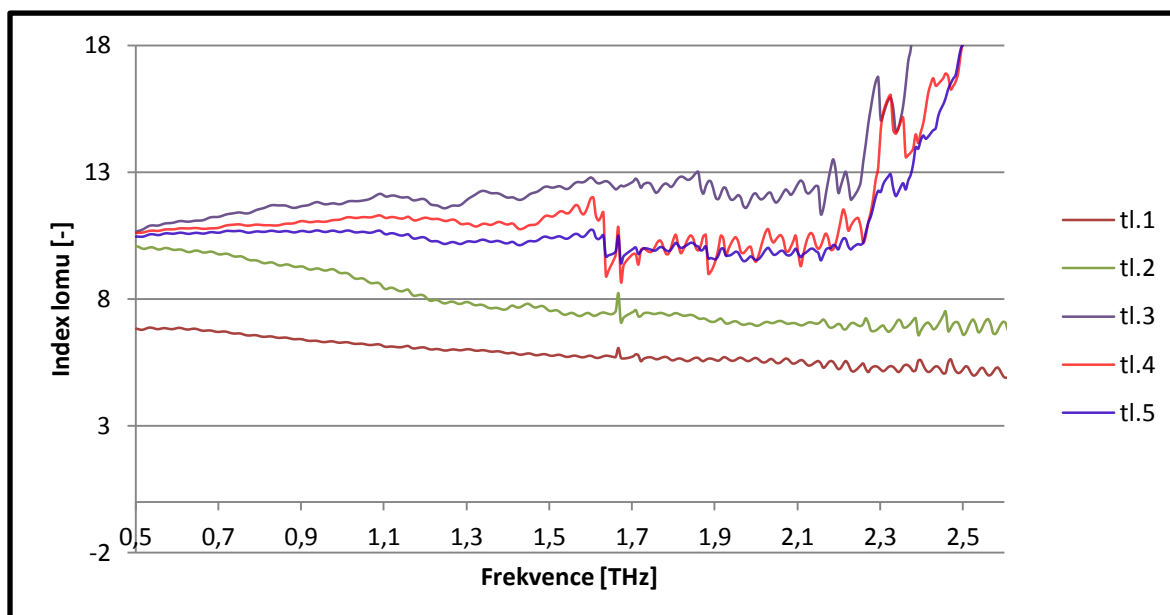
5.1.3 Měření transmisní spektroskopii

Pro měření transmisní spektroskopii musely být vzorky připraveny jinak, než na ATR spektroskopii viz kapitola 5.1.1. Referenční vzorek se skládal z inertního lepidla a papíru. Každý vzorek byl vložen do držáku, poté byl přiložen kryt a bylo zpuštěno měření. Přístroj nám do počítal data, která poté byla vyhodnocena do grafu.



Graf. 3. Absorpce jedlé sody naměřen pomocí transmise

Ve výše uvedeném grafu závislosti absorpance na frekvenci, je zde srovnáno vzorků jedlé sody o rozdílných tloušťkách. U naměřených vzorků můžeme pozorovat opět píky okolo frekvence 1,7THz. Další charakteristickou vlastností všech vzorků je zvyšování absorpce s frekvencí. Vzorek číslo 1 a 2 mají podobný průběh pouze s tím rozdílem, že vzorek 2 má hodnotu absorpce o 1 větší. Mezi ostatními vzorky lze pozorovat rozdíl od frekvence 0,7 THz do 1,6 THz, kde s rostoucí tloušťkou roste i absorpce a lze zde rozeznat rozdílné tloušťky. Po frekvenci 1,9 THz se vzorky 3, 4 a 5 začínají překrývat a absorpce je zde vysoká.



Graf. 4 Index lomu jedlé sody naměřen pomocí transmise

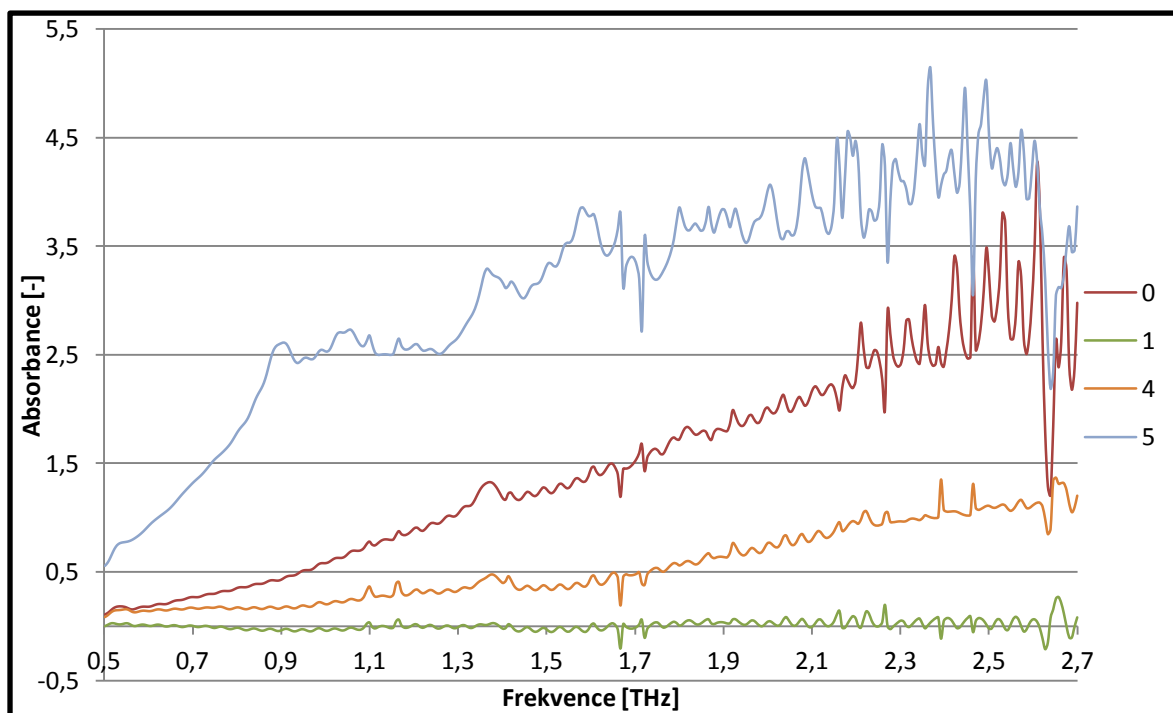
Graf. 4 zobrazuje závislost indexu lomu na frekvenci. Index lomu vzorku 1 a 2 má podobný průběh ale liší se ve velikosti indexu lomu. Ostatní tři vzorky se chovají zcela jinak, jejich průběh se s frekvencí 1,7 THz změní, začnou vibrovat a pro tyto hodnoty se THz spektroskopie zdá být nedostatečně popisnou a poté hodnoty velmi prudce začnou růst.

5.2 Měření léků

Po přípravě vzorků a provedení přípravy k měření bylo zahájeno měření. Měřené vzorky byly podrobeny ATR a transmisní spektroskopii. U každého vzorku byla provedena série měření. Naměřené hodnoty byly napsány do textových souborů a výsledné spektra byla zprůměrována. Z výsledků byly vytvořeny grafy závislosti absorpce a indexu lomu na frekvenci.

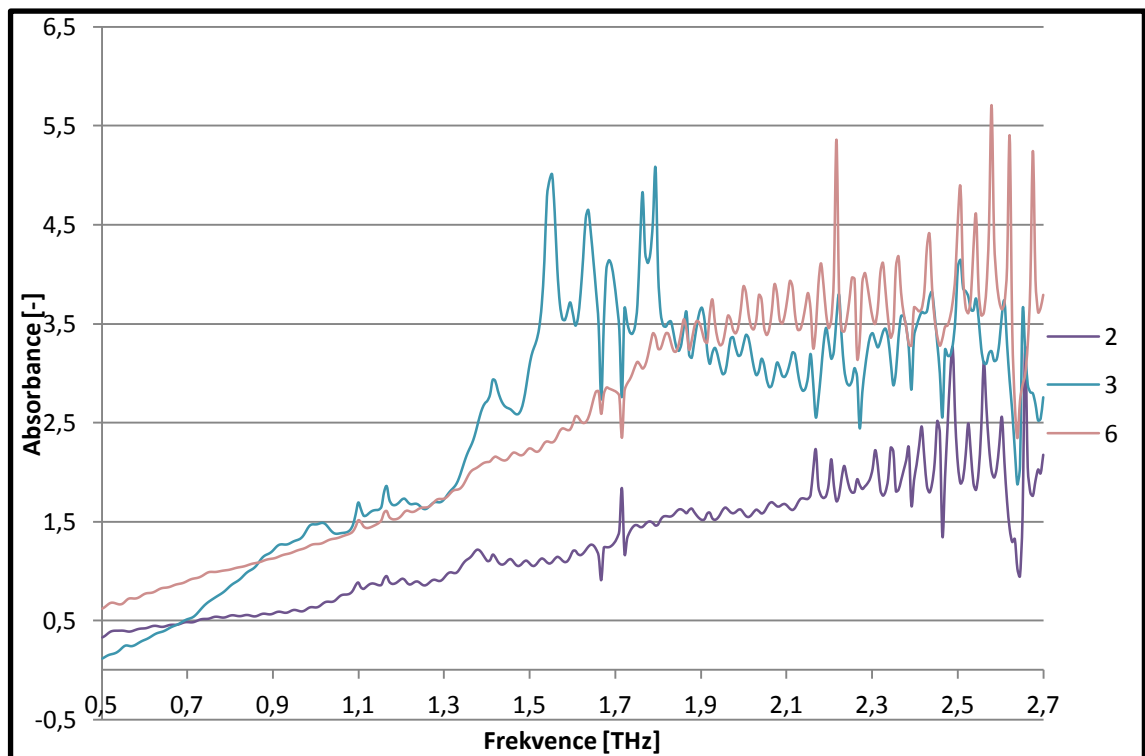
5.2.1 Měření léčiv transmisní spektroskopii

S předem připravenými vzorky a po přípravě na měření bylo postupováno jako u měření s jedlou sodou pouze s vzorky s léčivy. Data byla zpracována a zanalyzována. Byly vytvořeny grafy v rozmezí 0,5 THz – 2,7 THz, v grafech jsou uvedeny závislosti absorpce a indexu lomu na frekvenci. Z naměřených hodnot absorpce byly vytvořeny dva grafy, z důvodu mnoha vzorků překrývající svůj průběh. Grafy jsou formátovány úplně stejně, mají tedy shodné měřítko, osy i jednotky.



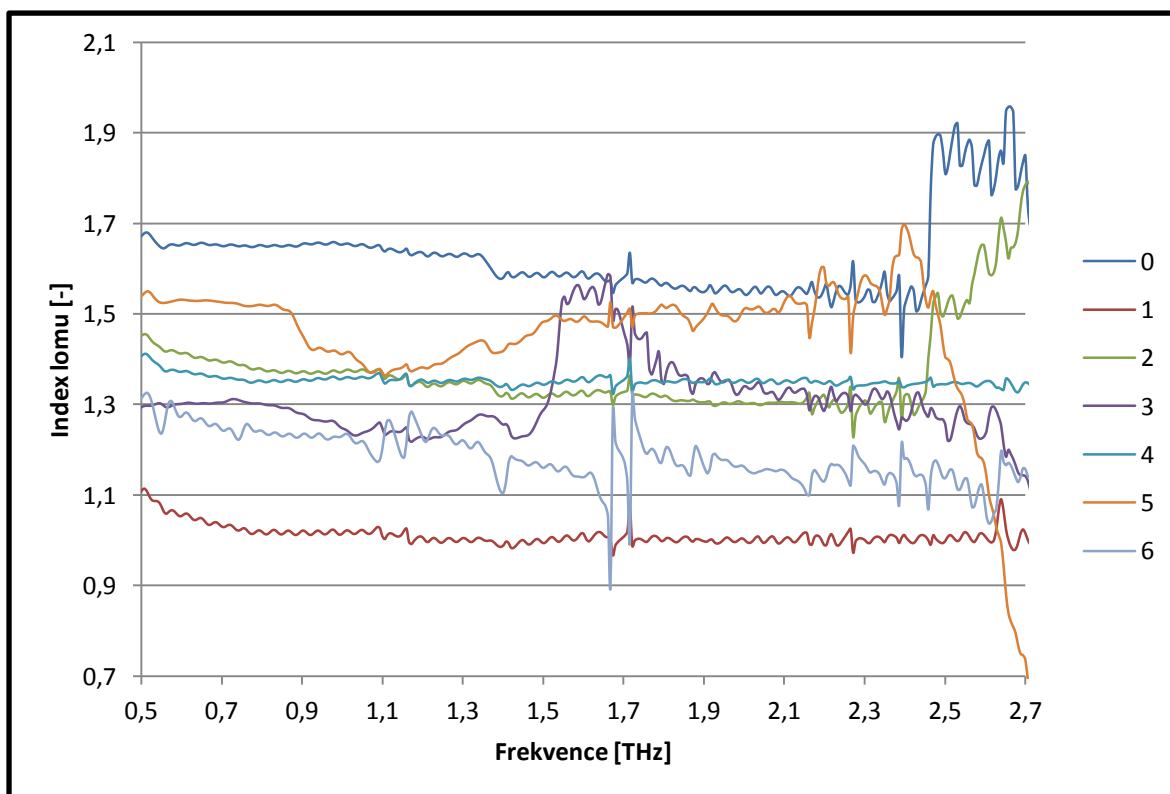
Graf. 5. První část Absorpce léčiv

V prvním ze dvou grafů (Graf. 5) vidíme vzorky 0,1,4 a 5. Všechny vzorky mají píky okolo frekvence 1,7 THz a menší píky mezi frekvencemi 1,1 THz a 1,2 THz. Vzorek 1 má velmi nízkou absorpci a z výsledného grafu lze vyčíst pouze menší píky mezi frekvencemi 1,1 THz a 1,2 THz a okolo 1,7 THz. Vzorek číslo 5 má výrazný pík na frekvenci 0,9 THz, do kterého prudce stoupá od začátku grafu. Další výraznější pík je na frekvenci 1,37 THz. Od frekvence 1,9 THz lze pozorovat velké vibrace ve všech vzorcích. Vzorky 1 a 4 mají také výrazný pík na frekvenci 1,37 THz.



Graf. 6 Druhá část absorpce léčiv

Na druhém grafu (Graf. 6) lze pozorovat vzorky 2,3 a 6. Všechny vzorky mají vibrace na frekvencích 1,1 THz, 1,2 THz a v okolí frekvence 1,7 THz. Vzorky 2 a 6 mají podobnou stoupavost ale rozdílné vibrace. Můžeme si všimnout mírné píky na frekvencích 1,35 THz. Vzorek číslo 3 má výrazný pík na frekvenci 1,42 THz.

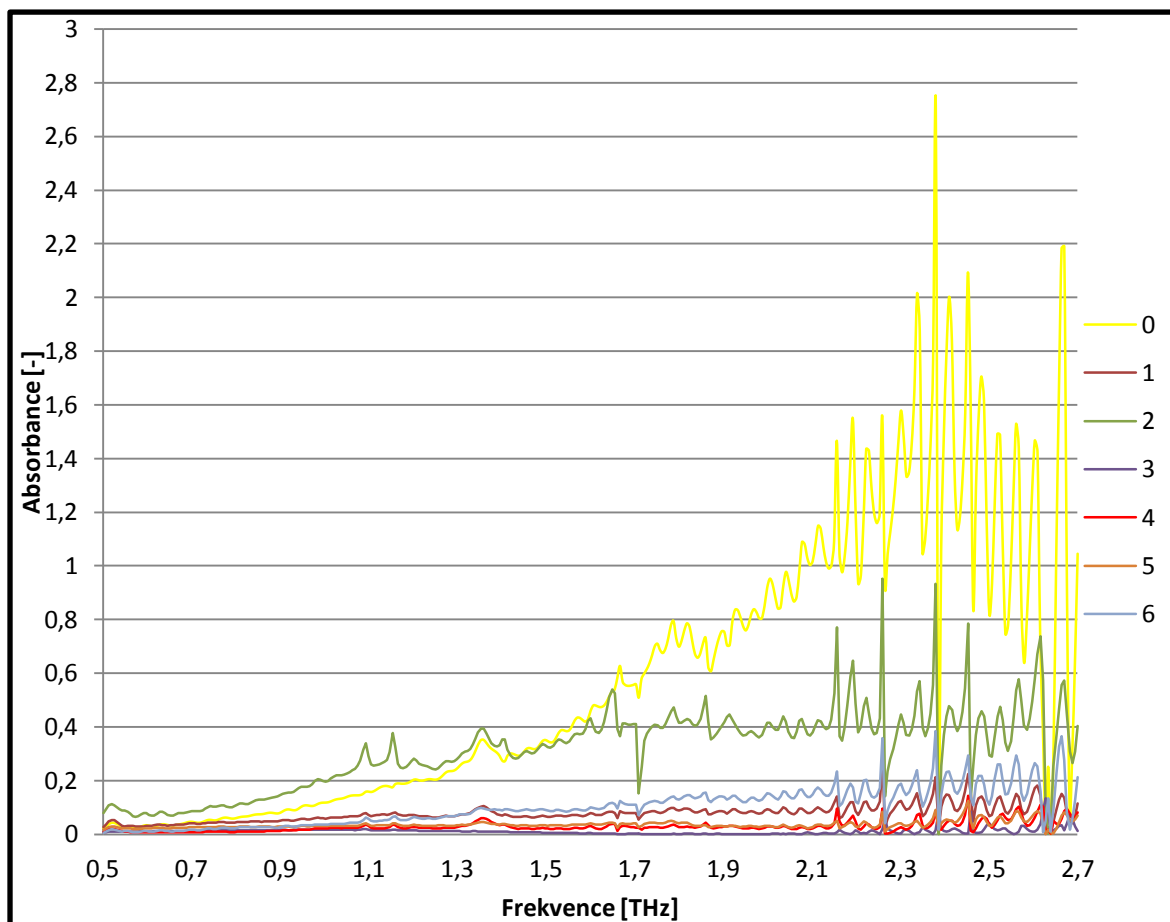


Graf. 7. Index lomu měřených léčiv

Na grafu (Graf. 7) je zobrazena závislost indexu lomu na frekvenci, u všech vzorků lze pozorovat různé druhy indexu lomu. Vzorky 1, 2 a 4 drží mírně klesající index lomu v závislosti na zvyšující se frekvenci. Jsou zde opět parné vibrace okolo 1,1 THz a 1,7 THz. Mezi další vibrace se může počítat pokles indexu lomu u vzorku číslo 5 na frekvenci 0,92 THz a u všech vzorku kromě vzorku číslo 1 lze vidět pik na frekvenci 1,34 THz.

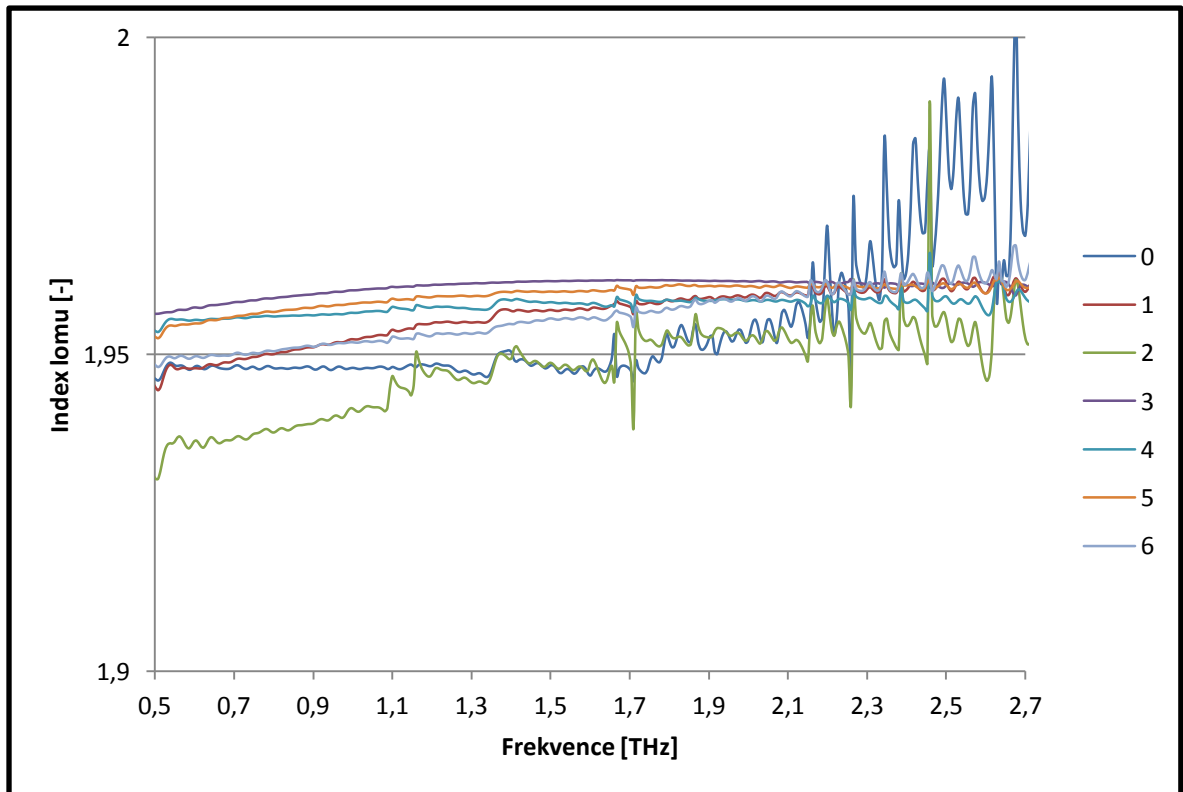
5.2.2 Měření léčiv ATR spektroskopií

Po přípravě k měření, kdy byly nachystány vzorky a měřicí přístroj byl připraven k provozu i s nainstalovaným ATR modulem, bylo přikročeno k měření. Prášek byl umístěn na krystal a pomocí tlaku bylo dosaženo kontaktu krystalu s materiálem



Graf. 8 Absorpce měřených léčiv pomocí ATR

Graf. 8 je graf závislosti absorpce na frekvenci naměřené pomocí ATR spektroskopie můžeme pozorovat odlišný průběh absorpce vzorku 2, ostatní vzorky mají podobný průběh. Vzorek 3 nemá žádné výrazné vibrace. Vzorky 1,4 a 6 mají velmi podobné průběhy, menší píky jsou zřejmé na frekvencích 1,1 THz, 1,16 THz a 1,35 THz, okolo frekvence 1,7 THz lze vidět pokles absorpce, na frekvencích 2,14 THz, 2,25 THz, 2,45THz lze pozorovat výrazné vibrace. Vzorek 2 má výrazné vibrace okolo frekvence 1,7 THz, píky lze pozorovat na frekvencích 1,1 THz a 1,16 THz a 1,35 THz a dále 2,14 THz, 2,25 THz, 2,45THz.



Graf. 9. Index lomu měřených léčiv pomocí ATR

Z hodnot indexu lomu naměřené pomocí ATR spektroskopie byl vytvořen graf. 9, hodnoty indexu lomu jsou závislé na frekvenci. Na grafu lze pozorovat velmi podobné indexy lomu vzorků 1,3,4,5,6 rozdílné indexy lomu mají vzorek 0 a vzorek 2. U vzorku 2 po překročení frekvence 2,1 se spektrum rozvibruje a začne stoupat.

6 DISKUZE VÝSLEDKŮ

V první části měření byla měřena závislost absorpce na tloušťce vzorků, z výsledků je zřejmé že tloušťka vzorků ovlivňuje absorpci, s rostoucí tloušťkou roste absorpce. Frekvence píků ovšem zůstává stejná, vybrané tloušťky neovlivňují schopnost rozeznat danou látku. To potvrdily obě metody měření. Indexy lomu všech vzorků u metody ATR se pohybují v rozmezí 1,9 až 2, a indexy lomu u transmisní spektroskopie se hodnoty všech vzorků pohybují od 5,8 do 13. Metoda ATR má menší rozmezí hodnot a je méně náchylná k chybám měření, které souvisí s tloušťkou vzorku.

V druhé části měření byly měřeny vybrané léčiva. Z výsledků naměřené absorpce transmisní spektroskopii, lze usoudit, že spektra měřených léčiv jsou různá a vzorky lze od sebe rozeznat. Vzorek číslo 5 má zcela odlišný průběh s vysokou absorpcí, naproti tomu absorpce vzorku číslo 1 vibruje okolo nuly. U všech vzorků byly změřeny vibrace u frekvence 1,1 THz až 1,2 THz, dále 1,35 THz, okolo 1,7 THz, 2,14 THz, 2,25 THz, 2,45 THz. U výsledků naměřené absorpce pomocí ATR spektroskopie, již nejde vidět u všech vzorků tak rozdílné spektra a spektra mají podobný průběh, vzorek číslo 3 nemá žádné charakteristické vibrace, vzorek číslo 2 má výrazně vyšší absorpci než ostatní vzorky. Píky se vyskytují u stejných frekvencí jako v případě transmisní spektroskopie. Jedná se o frekvence 1,7 THz patřící k N–H vazbám, 1,9 THz patřící C–C vazbám, v oblasti za 2 THz vibrují vazby s dusíkem a CH₃, tyto vazby obsahuje i pseudoefedrin, ale některé vazby obsahují i ostatní pomocné látky. Dle složení měřené prášky obsahují pseudoefedrin. Měřením ovšem nebyla přímo dokázána přítomnost pseudoefedrinu, ale díky složení lze předpokládat, že výsledné vibrace, která z měření vyplývají, patří i pseudoefedrinu. Indexy lomu u metody ATR mají velmi podobný průběh u všech měřených léčiv, kromě vzorku číslo 2 tento vzorek má zcela jiný průběh. Výsledné indexy lomu se pohybují okolo 1,95. Indexy lomu u transmisní spektroskopie mají vzorky velmi rozdílné a lze je rozeznat od sebe. Jen vzorky číslo 2 a 4 mají skoro stejný průběh i stejný index lomu do frekvence 2,1 THz poté jsou průběhy různé. [13]

ZÁVĚR

Bakalářská práce popisuje základní princip terahertzové spektroskopie, je popsán vznik terahertzového záření, jeho vlastnosti a využití. Využití této technologie je prozatím omezeno zejména vysokou cenou přístrojů, hlavní příčinou vysoké ceny jsou použité technologie a zdroje terahertzového napětí. V budoucnu by tato technologie ovšem mohla být velice rozšířená a to hlavně kvůli prostupným vlastnostem terahertzového záření. Za pomoci technologií a softwaru lze efektivně kontrolovat skryté zbraně nebo výbušniny bez nutnosti osobních prohlídek. Metoda dále umožňuje zjišťovat složení látek a detekovat určité problémy které pouhým lidským okem nejsou zřejmé, například rozsáhlost rakoviny kůže nebo kontroly rovnoměrnosti povrchů jakýchkoliv výrobků.

Hlavním cílem práce bylo navrhnout a uskutečnit experiment na pulzním spektrometru TPS Spectra 3000 a seznámit se tak s terahertzovým zářením v praxi. Experiment byl proveden za dohledem vedoucí práce. První část měření byla zaměřena na zjištění dopadu tloušťky měřeného vzorku na výsledky měření. Druhá část byla zaměřena již na měření vybraných léčiv, měření bylo provedeno za účelem detekce pseudoefedrinu ve vybraných léčivech. Následně byla data analyzována a upravena do grafické podoby a vyhodnoceny. Z první část měření lze dedukovat, že tloušťka vzorků má vliv na výsledky měření. Se zvětšující se tloušťkou se absorbance zvětšuje a liší se i amplitudy píků, ovšem frekvence charakteristických píků zůstávají totožné. Lze tedy usoudit, že vybrané tloušťky neovlivnily schopnost charakterizovat stejnou látku podle svého spektrálního vzorku. V druhé části měření u vybraných léčiv lze z vibrací usoudit, že vybrané léčiva obsahují charakteristické vazby a jejich vibrace, tyto vazby jsou obsaženy i v pseudoefedrinu. Vybrané léčiva mohou být tedy použity k výrobě metamfetaminu, a jelikož vybrané léčiva obsahují pseudoefedrin a pomocné látky mají velmi podobné spektra a jsou mezi sebou těžce k rozeznání.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] KRČMA, Michal. Terahertzová spektroskopie pro detekci výbušných látek. Zlín: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, 2014, 52 s. Dostupné také z: <http://hdl.handle.net/10563/29948>. Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. Fakulta aplikované informatiky, Ústav elektroniky a měření. Vedoucí práce Gavenda, Tomáš.
- [2] VANČUROVÁ, Lucie. Moderní spektroskopické metody ve forenzní analýze. Zlín: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, 2013, 87 s. Dostupné také z: <http://hdl.handle.net/10563/25308>. Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. Fakulta aplikované informatiky, Ústav elektroniky a měření. Vedoucí práce Vašková, Hana.
- [3] GAVENDA, Martin. Využití terahertzových frekvencí v bezpečnostních aplikacích. Zlín: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, 2011, 109 s. Dostupné také z: <http://hdl.handle.net/10563/16091>. Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. Fakulta aplikované informatiky, Ústav elektroniky a měření. Vedoucí práce Křesálek, Vojtěch.
- [4] TeraView [online]. 2010 [cit. 2016-05-07]. Products - TPS Spectra 3000. Dostupné z WWW: <<http://www.teraview.com/terahertz/products/terahertzpulzed-spectra-3000/index.html>>.
- [5] BERKA, Karel. Chemické nástroje detektivů. [online]. [cit. 2016-05-07]. Dostupné z: <http://ksicht.natur.cuni.cz/serialy/detektivni-chemie/2>
- [6] INFRAČERVENÁ SPEKTROSKOPIE. [online]. [cit. 2016-05-07]. Dostupné z: <http://web.natur.cuni.cz/analchem/pprakt/ftir.pdf>
- [7] ŠTĚPÁNÍK, Daniel. Využití THz spektroskopie ve vybraných bezpečnostních aplikacích. Zlín: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, 2013, 109 s. Dostupné také z: <http://hdl.handle.net/10563/25438>. Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. Fakulta aplikované informatiky, Ústav elektroniky a měření. Vedoucí práce Křesálek, Vojtěch.
- [8] FEDERICI, John, et al. THz imaging and sensing for security applications: explosives, weapons and drugs. In Semiconductor Science and Technology. United Kingdom 2005. [online]. [cit. 2016-05-07]. Dostupné z: https://web.njit.edu/~federici/Research/THz/sst5_7_018.pdf
- [9] TOBOLÍK, Jiří. Využití terahertzového vlnění v bezpečnostní komunitě. Zlín: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, 2010, 70 s. Dostupné také z:

<http://hdl.handle.net/10563/13554>. Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně. Fakulta aplikované informatiky, Ústav elektrotechniky a měření. Vedoucí práce Juříčka, Martin.

- [10] ŠTEFUNKOVÁ, Michaela (ed.). *Metamfetamin (pervitin): situace v EU a její globální kontext*. Praha: Centrum adiktologie, Psychiatrická klinika 1. LF UK a VFN v Praze, 2010. Učební texty (Všeobecná fakultní nemocnice. Centrum adiktologie). ISBN 978-80-86620-24-4.
- [11] Evropská zpráva o drogách 2014 [online]. [cit. 2016-05-07]. Dostupné z: <http://www.vlada.cz/cz/ppov/protidrogova-politika/media/evropska-zprava-o-drogach-2014-119187/>
- [12] HAVLÍČEK, Stanislav. *Léčivé přípravky s obsahem pseudoefedrinu - surovina pro nelegální výrobu metamfetaminu*. Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, 2009. [online]. [cit. 2016-05-07]. Dostupné z: <https://is.cuni.cz/webapps/zzp/detail/78741/>
- [13] SULOVSÁ, Kateřina a Marián LEHOČKÝ. *Terahertz spectroscopy characterization of antibacterial surfaces prepared via multistep physicochemical procedure*. *Optical Engineering* [online]. 2015 [cit. 2016-05-27]. ISSN 0091-3286. Dostupné z: <http://opticalengineering.spiedigitallibrary.org/article.aspx?articleid=2203883>.

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

Hz	Hertz, jednotka frekvence
THz	Terahertz, jednotka frekvence
GHz	Gigahertz, jednotka frekvence
μm	Mikrometr, jednotka délky
mm	Milimetr, jednotka délky
nm	Nanomilimetr, jednotka délky
GaAs	Arsenid gallitý
DAST	Organický krystal
ZnS	Sulfid zinečnatý
ATR	Zeslabená úplná reflektance
DFG	Směšování rozdílných frekvencí
AV	Voltamperová (charakteristika)

SEZNAM OBRÁZKŮ

Obr. 1 THz spektrum [2]	11
Obr. 2 Optická rektifikace [3]	12
Obr. 3 Směšování rozdílných frekvencí (DFG) [3]	12
Obr. 4 Frekvenční multiplikování mikrovln [3]	13
Obr. 5 VA charakteristika Gunn diody [3]	13
Obr. 6 Přístroj TPS spectra 3000 [4]	14
Obr. 7 Princip ATR [5]	16
Obr. 8 Porovnání povrchů léků [4]	17
Obr. 9 Lidská kůže pozorována lidským okem (vlevo) a THz zobrazením (vpravo) [4]	18
Obr. 10 Detail zubu [4]	18
Obr. 11 Příklady THz spekter výbušnin a textilu [4]	19
Obr. 12 Kontrola zásilek či zavazadel [8]	20
Obr. 13 Detekce výbušnin pomocí odrazu [8]	20
Obr. 14 Strukturní vzorec metamfetaminu [12]	21
Obr. 17 Chemická reakce při výrobě metamfetaminu z efedrinu [12]	22
Obr. 16 Strukturní vzorec efedrinu [12]	23
Obr. 15 Strukturní vzorec pseudoefedrinu [12]	23
Obr. 18 ART modul [4]	28
Obr. 19 Měřicí prostor u transmise v přístroji TPS spectra 3000 [4]	28

SEZNAM TABULEK

Tab. 1 Seznam vybraných léčiv	27
Tab. 2. Tloušťka vzorků	29
Tab. 3. Tloušťka vzorků	30

SEZNAM GRAFŮ

Graf. 1. Absorpce jedlé sody ATR.....	30
Graf. 2 Index lomu ATR.....	31
Graf. 3. Absorpce jedlé sody naměřen pomocí transmise	32
Graf. 4 Index lomu jedlé sody naměřen pomocí transmise	33
Graf. 5. První část Absorpce léčiv	34
Graf. 6 Druhá část absorpce léčiv	35
Graf. 7. Index lomu měřených léčiv.....	36
Graf. 8 Absorpce měřených léčiv pomocí ATR	37
Graf. 9. Index lomu měřených léčiv pomocí ATR.....	38