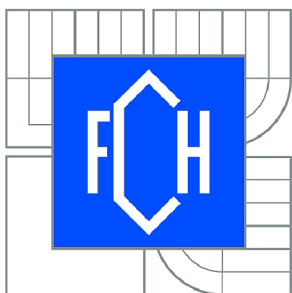




VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA CHEMICKÁ

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ A SPOTŘEBNÍ CHEMIE

FACULTY OF CHEMISTRY

INSTITUTE OF PHYSICAL AND APPLIED CHEMISTRY

# VYUŽITÍ FLUORESCENČNÍ SPEKTROSKOPIE VE STUDIU LÁTEK TVOŘÍCÍCH AEROSOL

FLUORESCENCE SPECTROSCOPY IN STUDY OF AEROSOL-FORMING SUBSTANCES

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

JOSEF LIPPAY

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. FILIP MRAVEC, Ph.D.

BRNO 2011



Vysoké učení technické v Brně  
**Fakulta chemická**  
Purkyňova 464/118, 61200 Brno 12

## Zadání bakalářské práce

Číslo bakalářské práce:	<b>FCH-BAK0514/2010</b>	Akademický rok: <b>2010/2011</b>
Ústav:	Ústav fyzikální a spotřební chemie	
Student(ka):	<b>Josef Lippay</b>	
Studijní program:	Chemie a chemické technologie (B2801)	
Studijní obor:	Spotřební chemie (2806R002)	
Vedoucí práce	<b>Ing. Filip Mravec, Ph.D.</b>	
Konzultanti:	Ing. Tereza Halasová	

### Název bakalářské práce:

Využití fluorescenční spektroskopie ve studiu látek tvořících aerosol

### Zadání bakalářské práce:

1. Shromáždit literární poznatky o látkách používaných při přípravě modelových aerosolů, především bis(2 ethylhexyl)dekandioátu (DEHS).
2. Ověřit standardně využívaná stanovení částic aerosolu těchto látek za přítomnosti fluoresceinu a ověřit přirozenou luminiscenci využívané látky DEHS.
3. Na základě pozorování stanovit míru rušení stanovení koncentrace těchto aerosolových částic značených DEHS a stanovit jeho luminiscenční spektra v různých prostředích.
4. Na základě výsledků zhodnotit využívané metody stanovení, případně navrhnout jejich modifikaci.

### Termín odevzdání bakalářské práce: 6.5.2011

Bakalářská práce se odevzdává ve třech exemplářích na sekretariát ústavu a v elektronické formě vedoucímu bakalářské práce. Toto zadání je přílohou bakalářské práce.

-----  
Josef Lippay  
Student(ka)

-----  
Ing. Filip Mravec, Ph.D.  
Vedoucí práce

-----  
prof. Ing. Miloslav Pekař, CSc.  
Ředitel ústavu

V Brně, dne 31.1.2011

-----  
prof. Ing. Jaromír Havlica, DrSc.  
Děkan fakulty

## **ABSTRAKT**

Pro studium spektrální charakteristiky látky DEHS bylo navrženo několik experimentů. Bylo provedeno bližší zkoumání vlivu různých prostředí na spektrální vlastnosti látky DEHS. Bylo zjištěno, že nejvyšší pozitivní vliv na fluorescenci látky DEHS mají prostředí s hydroxylovými skupinami. Jako nejvhodnější prostředí pro následné experimenty byl vyhodnocen IPA. Bylo prokázáno, že prostředí xylenu utlumuje fluorescenci DEHS na detekční minimum. Byla provedena spektrální charakterizace nedegradovaného a degradovaného DEHS. Bylo zjištěno, že u degradovaného DEHS dochází vlivem degradace k posunu k vyšším vlnovým délkám. Možná kontaminace DEHS látkami způsobujícími luminiscenci nebyla prokázána.

## **ABSTRACT**

To study the spectral characteristics of a substance DEHS several experiments were suggested. Closer investigation was made on study of the effect of different environments on the spectral properties of the substance DEHS. It was found that the highest positive effect on the fluorescence of the substance DEHS have a medium with hydroxyl groups. IPA was evaluated as the best medium for further experiments. It was found that the medium xylene decreases intensity of the fluorescence to the detection limit. Spectral characterization of the nondegraded and degraded DEHS was performed. It was found that for the degraded DEHS shift to higher wavelengths occurs due to degradation. Possible contamination of the DEHS with substances causing luminescence has not been proven.

## **KLÍČOVÁ SLOVA**

bis(2-ethylhexyl)dekandioát, dioktyl sebakát, DEHS, fluorescence, fluorescein, degradace, aerosol

## **KEYWORDS**

bis(2-ethylhexyl) decanedioate, dioctyl sebacate, DEHS, fluorescence, fluorescein, degradation, aerosol

LIPPAY, J. *Využití fluorescenční spektroskopie ve studiu látek tvořících aerosol*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2011. 40 s. Vedoucí bakalářské práce Ing. Filip Mravec, Ph.D.

## **PROHLÁŠENÍ**

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracoval samostatně a že všechny použité literární zdroje jsem správně a úplně citoval. Bakalářská práce je z hlediska obsahu majetkem Fakulty chemické VUT v Brně a může být využita ke komerčním účelům jen se souhlasem vedoucího bakalářské práce a děkana FCH VUT.

.....  
podpis studenta

*Poděkování:  
Rád bych poděkoval Ing. Filipovi  
Mravcovi, Ph.D. a Ing. Tereze  
Halasové za zaštitění mojí práce  
a dále za jejich neutuchající  
podporu a trpělivost.*

## OBSAH

<b>1</b>	<b>ÚVOD</b> .....	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>TEORETICKÁ ČÁST</b> .....	<b>7</b>
2.1	DEHS.....	7
2.2	FLUORESCENCE.....	7
2.2.1	Princip fluorescence.....	7
2.2.2	Emisní a excitační spektrum fluorescence.....	9
2.2.3	Hlavní pravidla fluorescence.....	10
2.2.4	Zhášení.....	10
2.2.5	Excimery.....	11
2.2.6	Instrumentace.....	11
2.3	Současné řešení problematiky.....	12
<b>3</b>	<b>EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST</b> .....	<b>15</b>
3.1	Použité chemikálie.....	15
3.2	Příprava vzorků a jejich měření.....	15
3.2.1	Spektrální charakterizace DEHS :.....	15
3.2.2	3D skeny DEHS ve vybraných prostředích.....	15
3.2.3	3 Stabilitní testy pro DEHS:.....	16
3.2.4	4. IČ spektra DEHS:.....	16
3.2.5	3D skeny pro nedegradovaný a degradovaný DEHS.....	16
3.3	Metody měření.....	16
3.3.1	Fluorescence.....	16
3.3.2	FT-IR spektroskopie.....	17
<b>4</b>	<b>VÝSLDEKY A DISKUZE</b> .....	<b>18</b>
4.1	Spektrální charakterizace DEHS :.....	18
4.2	3D skeny DEHS ve vybraných prostředích.....	18
4.3	Stabilitní testy pro DEHS:.....	26
4.4	IČ spektra DEHS:.....	27
4.5	3D skeny pro nedegradovaný a degradovaný DEHS.....	29
<b>5</b>	<b>ZÁVĚR</b> .....	<b>36</b>
<b>6</b>	<b>SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ</b> .....	<b>38</b>
<b>7</b>	<b>SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ</b> .....	<b>40</b>
7.1	Seznam zkratk.....	40
7.2	Seznam symbolů.....	40

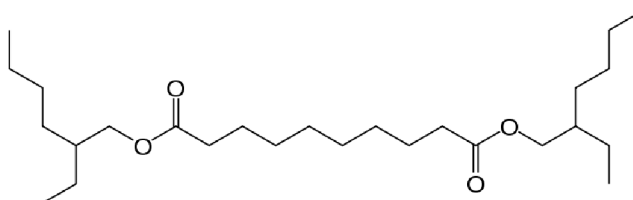
# 1 ÚVOD

Tato práce vznikla na základě projektu Experimentální výzkum depozice aerosolů v modelu plic fakulty strojního inženýrství VUT, jehož cílem je studium transportu a usazování aerosolových částic v lidském dýchacím ústrojí, kde jako model částic byl použit bis(2-ethylhexyl)dekandioát (dále jen jako DEHS) napařený na jádro NaCl [7]. Látka DEHS se pak v praxi používá k vytváření aerosolových částic díky tomu, že je bezbarvá, bez zápachu, dají se z ní vytvářet poměrně stabilní aerosoly o definovatelných vlastnostech a má relativně dlouhou dobu života aerosolových kapiček (i za vyšších teplot) [1,2]. Důvodem ke zkoumání je najít nejvhodnější tvar a velikost částic pro inhalační podání, což by mohlo napomoci při léčbě nemocí spojených s dýchacím ústrojím.

K určení koncentrace usazených částic v různých větvích modulu dýchacího ústrojí bylo použito značení aerosolových částic fluoresceinem a následné detekce pomocí fluorescenční spektroskopie. Tato metoda je běžně využívána pro sledování aerosolových částic v dýchacím ústrojí [2,3,4,5,6]. Na základě vyhodnocených výsledků byl zjištěn rozdíl ve tvarech emisních spekter pro kalibrační řadu fluoresceinu v isopropanolu oproti roztoku částic obalených DEHsem v isopropanolu. Na základě nových poznatků byla provedena další měření, z jejichž vyhodnocení můžeme konstatovat, že samotný DEHS vykazuje fluorescenci právě v oblasti, kde je detekována také emise fluoresceinu. Z tohoto důvodu je tato práce zaměřena na zkoumání látky DEHS a její fluorescence.

## 2 TEORETICKÁ ČÁST

### 2.1 DEHS



*Obrázek 1: Struktura DEHS*

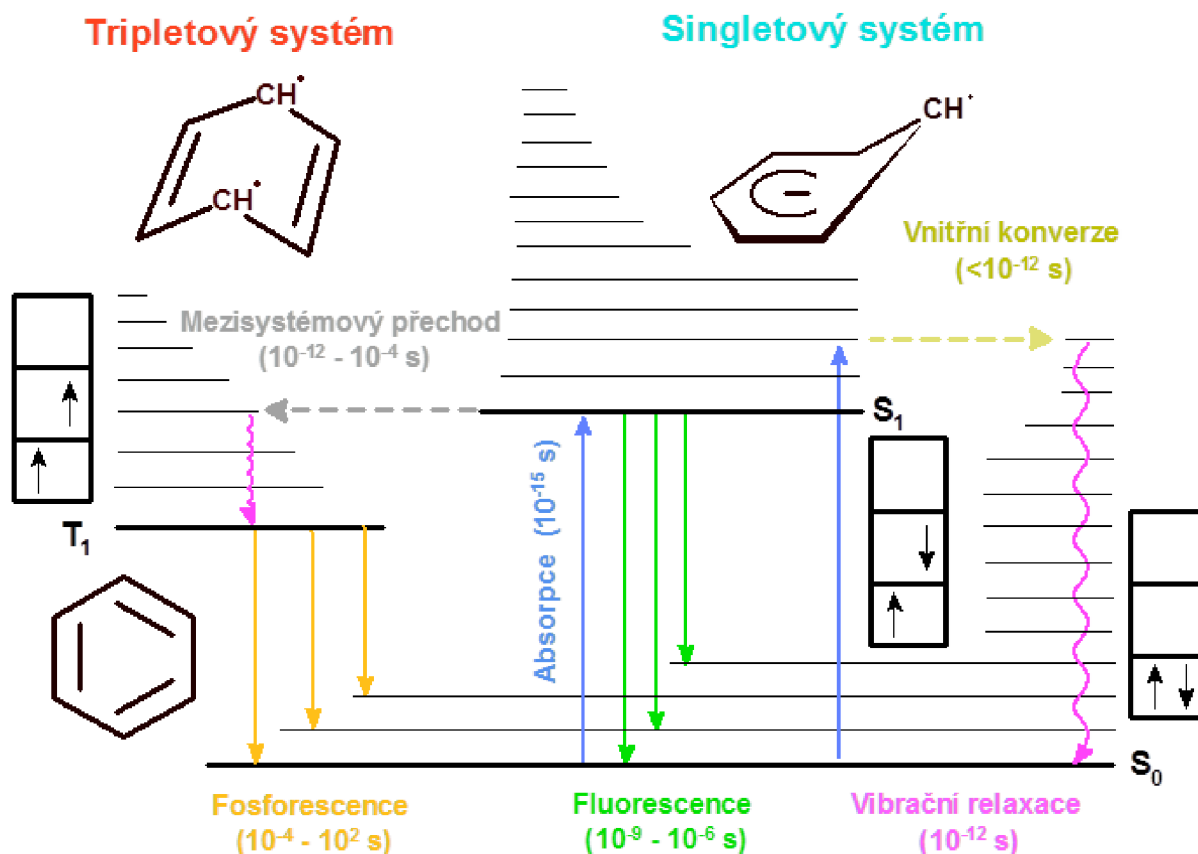
Bis(2-ethylhexyl)dekandioát je dvojným esterem kyseliny dekandiové (sebakové). Nejčastěji je vyráběn esterifikací 2-ethylhexynolu a kyseliny sebakové v poměru 1:1,6 a za přítomnosti kyseliny sírové, která pak zaujímá 0,25 % z celkové hmotnosti 2-ethylhexynolu a kyseliny sebakové pro esterifikaci do prvního stupně. Druhý stupeň esterifikace je pak náročnější a vyžaduje teplotu v rozmezí 130-140 °C. Poté následuje dehydratace za 0,093 MPa vakua. Surový ester je dále neutralizován 3-5% roztokem sody, promýván při 70-80 °C a následně je odstraněn alkohol za 0,096-0,097 MPa vakua. Posledním krokem je přečištění za pomoci vakuové destilace [1,8].

DEHS je pak používán v široké škále aplikací jako: mrazu odolný změkčovač pro PVC kabely, změkčovač pro polymery, mrazu odolný film, aditivum, atd. Jeho hlavní použití ve vědecké oblasti je pak pro vytváření aerosolových částic. Výhodou těchto částic je, že se z nich dají utvářet aerosolové částice o definovatelných vlastnostech, jsou poměrně časově i teplotně stabilní, je bezbarvý, bez zápachu, nerozpustný ve vodě, nehygroskopický a je netoxický [1,2,8].

### 2.2 FLUORESCENCE

#### 2.2.1 Princip fluorescence

Pokud organická molekula nacházející se v základním stavu ( $S_0$ ) absorbuje elektromagnetické záření, dojde k excitaci elektronu. Elektron pak přechází z orbitalu o nižší energii do nejbližšího neobsazeného orbitalu o vyšší energii. Při excitaci elektronu pak může dojít k vytvoření jednoho ze dvou elektronově rozdílných stavů. V prvním případě dochází ke vzniku singletového stavu ( $S_1$ ), kde jsou spiny obou elektronů antiparalelní. Vytvoření singletového stavu přímou excitací je z kvantově-mechanického hlediska nejpravděpodobnější. V druhém případě dojde ke vzniku tripletového stavu ( $T_1$ ) a spiny obou elektronů jsou orientovány paralelně.



Obrázek 2: Jablonskiho diagram

Excitovaná molekula se může zbavit přebytečné energie různými deaktivními procesy a to buď zářivými, nebo nezářivými. V Jablonskiho diagramu (Obr. 2) jsou znázorněny jednotlivé elektronové a vibronové (vibračně-elektronové) stavy a zároveň nejdůležitější aktivační i deaktivní procesy. V diagramu jsou aktivační a zářivé procesy označeny rovnými čarami a nezářivé procesy jsou znázorněny vlnovkami.

Nezářivé procesy jsou uskutečňovány mezi vibračně-rotačními hladinami různých elektronových stavů, při nichž se nemění celková energie systému, nedochází tedy k emisi elektromagnetického záření, ale ke zvýšení tepelné energie systému.

Nejdůležitějšími deaktivními procesy jsou procesy zářivé, při kterých dochází k emisi elektromagnetického záření, což tedy znamená vyzáření světelného kvanta. Tyto procesy jsou obecně nazývány luminiscence. Luminiscence se pak formálně rozděluje do dvou kategorií v závislosti na charakteru excitovaného stavu, tyto kategorie jsou: fosforescence a fluorescence. Fosforescence je kvantově-mechanicky „zakázaná“ luminiscence, a jedná se o přechod z energeticky vyššího stavu  $T_1$  do energeticky nižšího stavu  $S_0$ . Fluorescence je následkem spinově dovoleného přechodu obvykle z rovnovážné hladiny stavu  $S_1$  do některé vibrační hladiny základního stavu  $S_0$ .

Dalšími procesy, které konkurují fluorescenci, jsou například: mezisystémový přechod, vnitřní konverze, nezářivé procesy (které mohou být následovány fluorescencí), intramolekulární přenos a konformační změny. Interakce s jinými molekulami v excitovaném stavu mohou také konkurovat fluorescenci. Příkladem takových interakcí mohou být přesuny elektronu a protonu, přenos energie, tvorba excimeru nebo exciplexu. Tyto deexcitační procesy mohou konkurovat fluorescenční emisi v případě, že probíhají v časovém měřítku,



keré je srovnatelné s dobou, během níž se molekuly vyskytují v excitovaném stavu.

Fluorescence je z kvantově-mechanického hlediska nejpravděpodobnějším deexcitačním procesem. Fluorescenci lze pozorovat po celou dobu buzení, ale po ukončení buzení prakticky ihned zmizí **doba života** ( $\tau_0$ ). Fluorescence je průměrný čas mezi excitací a návratem do základního stavu a je tedy jednou z nejdůležitějších vlastností fluoroforů. Doba života je pak vyjádřena vztahem:

$$\tau_0 = \frac{1}{\sum_i k_i}, \quad (1)$$

kde  $k_i$  je rychlostní konstanta vyjadřující deaktivující procesy.

Druhým nejdůležitějším faktorem fluoroforů je **kvantový výtěžek** fluorescence. Ten je definován jako podíl intenzity fluorescence  $I_F$  a intenzity absorbovaného světla  $I_A$ .

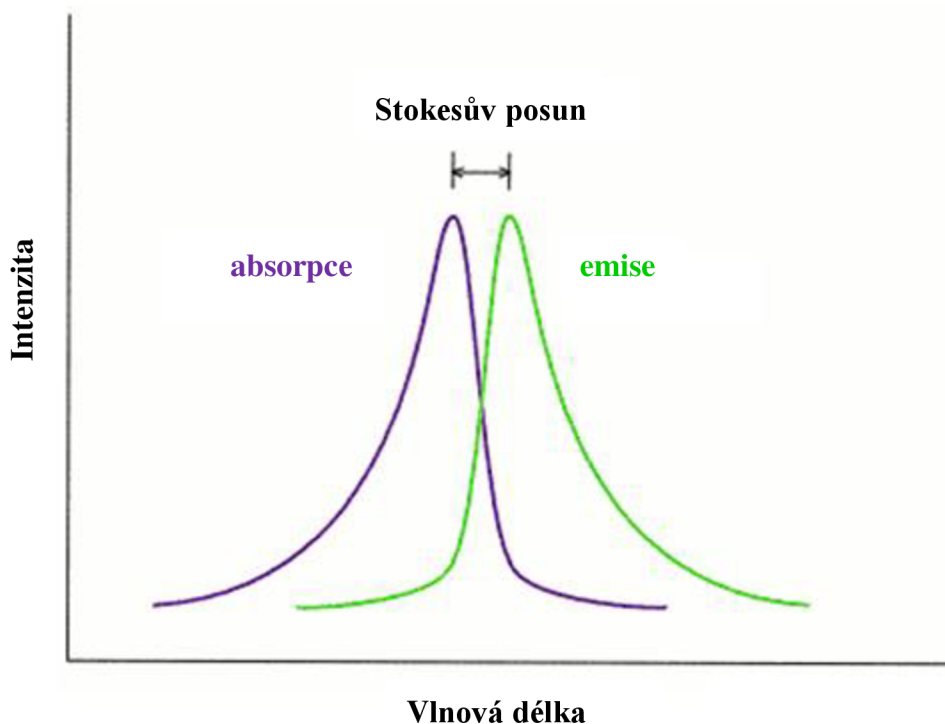
$$\Phi_F = \frac{I_F}{I_A} = \frac{k_r}{\sum_i k_i}, \quad (2)$$

kde  $k_r$  značí rychlostní konstantu fluorescence. [9,10,11]

### 2.2.2 Emisní a excitační spektrum fluorescence

Emisní spektrum vyjadřuje závislost intenzity fluorescence na vlnové délce při konstantní vlnové délce budícího záření. Excitační spektrum vyjadřuje závislost intenzity fluorescence na vlnové délce při konstantní vlnové délce emitovaného záření.

Tvar emisního spektra je charakteristicky pro dané sloučeniny a často bývá zrcadlovým obrazem spektra absorpčního. To je způsobeno tím, že absorpce i emise z odpovídajících si vibračních hladin mají stejnou relativní pravděpodobnost. Rozdíl mezi energií maxima prvního absorpčního pásu a maxima emisního spektra se nazývá **Stokesův posun** (Obr. 3). Tento důležitý parametr může poskytnout informace o excitovaném stavu. Například, když je dipólový moment fluoreskující molekuly vyšší než v základním stavu, Stokesův posun zvyšuje polaritu rozpouštědla. S důsledky tohoto jevu se musí počítat při odhadu polarity fluorescenčních sond [9,10,11].



*Obrázek 3: Příklad Stokesova posunu*

### 2.2.3 Hlavní pravidla fluorescence

Fluorescence se řídí několika pravidly. Prvním z nich je **Stokesův posun**, který říká, že vlnová délka fluorescenční emise při fotoluminiscenci je vždy větší nebo rovna vlnové délce excitačního záření ( $\lambda_{em} \leq \lambda_{ex}$ ). V praxi to tedy znamená, že dochází ke ztrátě energie excitačního záření, což má za následek snížení energie emitovaného záření, tedy zvýšení jeho vlnové délky.

Druhým pravidlem je **Kashovo pravidlo**, podle něhož dochází před emisí fluorescenčního kvanta k relaxaci vibrační energie a vnitřní konverzi, takže nastává fluorescenční přechod z nejnižší vibrační hladiny prvního excitovaného stavu  $S_1$ . Důvodem je, že energetický rozdíl mezi vyššími excitovanými stavy a stavem  $S_1$  je malý, nezářivé přeměny z těchto stavů do základního stavu probíhají velmi rychle.

Třetím principem je **Vavilův zákon**, který tvrdí, že kvantový výtěžek a doba trvání excitovaného stavu složitých molekul v roztoku nezávisí na vlnové délce budícího záření. Z toho vyplývá obecná vlastnost fluorescence a to, že emisní spektra jsou nezávislá na vlnové délce excitace [9,10,11].

### 2.2.4 Zhášení

Kromě unimolekulárních deaktivčních procesů, jako jsou emise nebo nezářivá deaktivace, existují také neméně důležité bimolekulární zhášecí procesy, které zahrnují přenos energie z jedné molekuly na druhou. Takovýto proces se obecně označuje jako zhášení. Zhášení je však velmi široký termín, který zahrnuje procesy odehrávající se různými mechanismy, jejich základní princip lze vystihnout následujícím schématem:



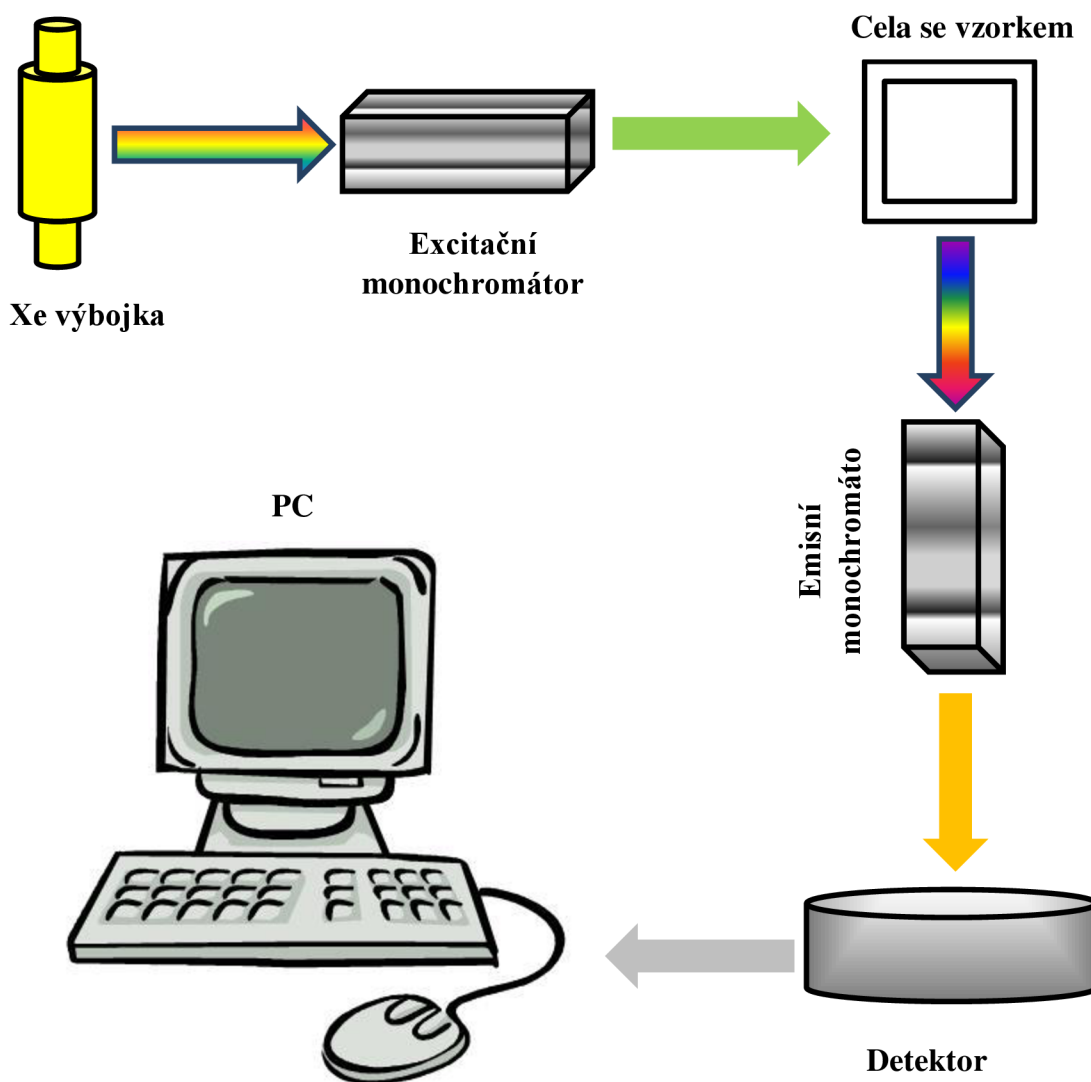
kde  $M^*$  vyjadřuje excitovaný stav molekuly,  $M$  základní stav molekuly a  $Q$  je zhášeč. Pokud je  $Q$  stejná molekula jako  $M$ , proces se nazývá samozhášení.

Hlavní fotofyzikální procesy, které jsou zodpovědné za zhášení fluorescence, jsou kolize s atomem těžkého kovu, přenos elektronu, protonu nebo energie, a také tvorba excimeru nebo exciplexu[9,10,11].

### 2.2.5 Excimery

V mnoha případech dochází k tomu, že zvýšení koncentrace látky je doprovázeno snížením kvantového výtěžku fluorescence. Je to způsobeno tím, že dochází k vytvoření stechiometrický komplex molekul, z nichž jedna je v základním a druhá v excitovaném stavu. Tento komplex je nazýván excitovaný dimer tzv. excimer. V takovémto případě plní funkci zhášecí Q samotná molekula fluoreskující látky M, a tudíž se jedná o samozhášení. Excimer je v emisním spektru charakterizován vlastním emisním pásem, který se objevuje při vyšších vlnových délkách než pás monomeru a postrádá jakoukoliv vibrační strukturu, jelikož slabé vazebné energie komplexu dovolují rozdílnou orientaci i konformaci molekul. Jedná se tedy o bimolekulární zhášecí proces, protože k poklesu fluorescence monomeru za nárůstu fluorescence excimeru [9,10,11].

### 2.2.6 Instrumentace



Obrázek 4: Schéma spektrofluorimetru

Na Obr. 4 lze vidět schéma znázorňující hlavní komponenty spektrofluorimetru. Zařízení tohoto typu mají několik hlavních součástí. První z těchto součástí je zdroj světla, kterým je většinou xenonová výbojka. Xenonové výbojky mají široké použití díky tomu, že dosahují vysoké intenzity záření při širokém rozsahu vlnových délek začínajících již při 250 nm. Záření vycházející z výbojky pak prochází další součástí přístroje a to excitačním monochromátorem, který vymezuje konkrétní vlnovou délku excitačního záření, která poté dopadá na vzorek. Vzorek je pak nejčastěji umístěn v držáku kyvety, která se v přístroji nachází na rohu pravého úhlu, který svírají oba monochromátory. Záření emitované vzorkem není monochromatické a proto je jako třetí součástí emisní monochromátor, který vymezuje vlnovou délku záření, které následně dopadá na detektor, jenž je tedy poslední hlavní součástí. Výstupem měření je pak fluorescenční spektrum a to buď emisní, excitační, případně synchronní.

V ideálním případě by měly mít hlavní součásti spektrofluorimetru následující vlastnosti: lampa by měla vyzařovat konstantní počet fotonu při všech vlnových délkách, fotony by měli procházet monochromátory při všech vlnových délkách bez ztráty energie a detektor by měl detekovat fotony všech vlnových délek se stejnou účinností.

### 2.3 Současné řešení problematiky

Výzkum léků a nosičových systému se vyvíjel několika fázemi a to od botanické fáze na počátcích lidské civilizace, přes syntetickou chemii v polovině 20 století až po moderní éru biotechnologií v 21 století [12]. Velký důraz je pak kladen na cílené nosiče léčiv a na vymezení jejich nejdůležitějších vlastností jako jsou biokompatibilita, biodegradabilita, schopnost interagovat na specificky cíleném místě. Další sledovanou vlastností při vývoji léčiv je to, aby během degradace léčiva neunikaly toxické látky pro organismus, které by naopak mohly případný stav zhoršit, nebo by mohlo dojít k jejich ukládání [13].

DEHS je jedna z aerosolu-tvárných látek, která se používá při vývoji cílených léčiv pro dýchací cesty. Je tak tomu díky faktu, že není toxický a že dokáže vytvářet unimolekulární vrstvu, což je velmi příznivé pro experimentální stanovení depozice aerosolových částic [1,3,7].

**Stephen M. Bowes III a David L. Swift** [2] se zabývali usazováním částic v orálním dýchacím ústrojí během oronazálního dýchání. DEHS v tomto případě byl požit jako obal pro fluorescenční jádro, kterým byl uranin (fluorescein sodný). Tato kombinace sloužila jako náhrada za použití radioaktivních látek. Vytvořený aerosol pak byl dobrovolníky přímo vdechován přes náustek a následně vydechován za simulace cvičení. Aerosol pak byl zachycen na filtru a byla stanovena míra depozice částic. Pro upřesnění dat byla stanovena míra ztráty aerosolu v ústní dutině. Výsledkem bylo, že k většímu usazování částic dochází se zvětšením velikosti částic. Ke snížení depozice pak při cvičení dochází díky tomu, že organismus potřebuje více kyslíku a tudíž jsou otevírána ústa pro lepší nasávání vzduchu.

**K. D. Horton a spol.** [3] zkoumali nově představený kondenzační typ aerosolového generátoru MAGE. Princip tohoto generátoru je založen na evaporaci DEHS a jeho kondenzaci na jádrech fluorescenční látky (zvolená látka však nemusí být fluorescenčního charakteru). MAGE jim tedy dovoľoval velmi rychle vytvořit monodisperzní aerosol o velikostech částic kolem 0,1  $\mu\text{m}$  a větších než 2  $\mu\text{m}$ , aerosoly těchto parametrů nejsou snadno produkovatelné jinými metodami. A déle došli k závěru, že tento typ generátoru aerosolových částí je též vhodný pro aerosolové částice, které jsou tvořeny sodnou solí fluoresceinu,

neboli uraninem (jádro) a DEHS (obal) díky vzniku dostatečně detekovatelní fluorescence jádra.

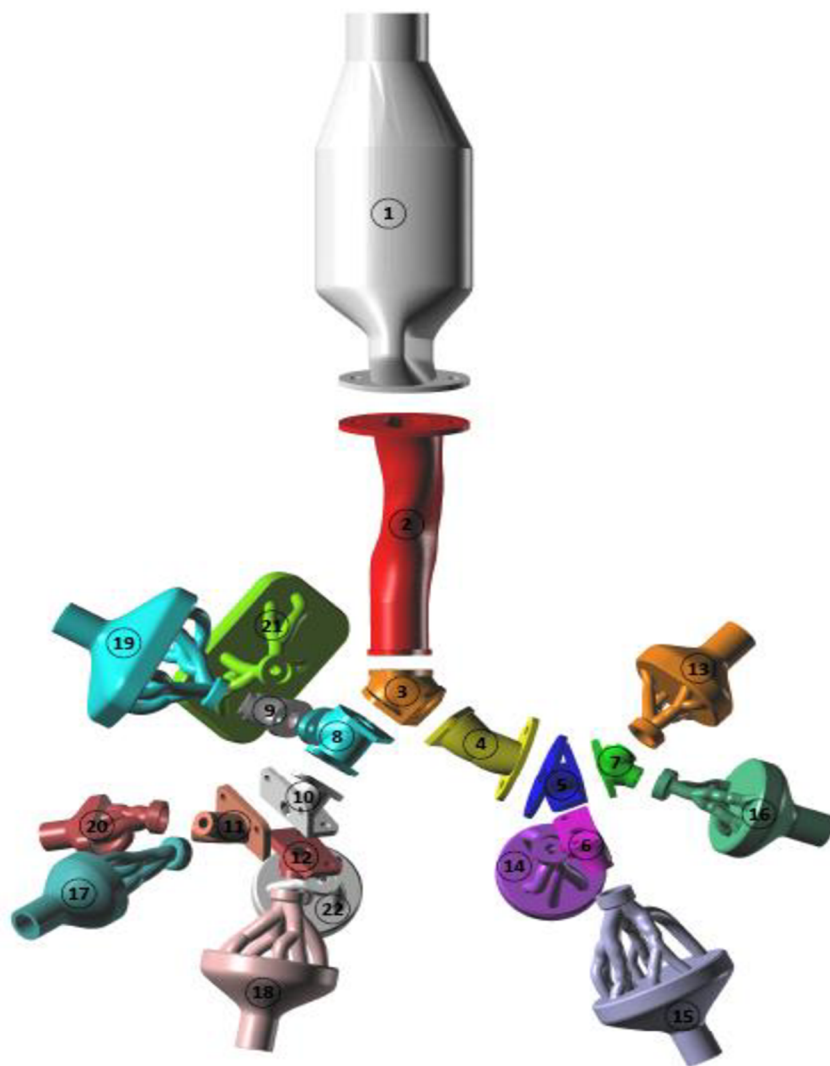
**B. Grgi a spol.** [4] studovali usazování aerosolových částic a jejich proudění v replice idealizovaných úst a krku. Studie byla prováděna pro oblast úst a krku hlavně z důvodu, že většina léků podávaných pro léčbu dýchacího ústrojí prochází přes ústa a krk nikoliv nos. Umělý model pak byl zvolen kvůli nákladnosti, komplexnosti experimentů prováděných in vivo a vykazují velmi rozdílná data u různých subjektů. Tento model pak zachovával geometrii úst a krku. Princip generace aerosolu byl stejný jako u MAGE. Výsledkem jejich práce bylo zjištění, že rychlost proudění i velikost částic značně ovlivňují depozici částic. K depozici částic pak docházelo v laryngální oblasti a v horních průdušnicích. Dále bylo zjištěno, že sevření nosohltanu a hlasivek je klíčový faktor, který ovlivňuje následné morfologické proudění, a tedy i depozici.

**Pavel Mikuška a Zbyněk Večeřa** [5] zkoumali nový typ aerosolového kolektoru kontinuální odběr vzorků atmosférických částic, tedy kolektor používající dvě protiproudé trysky a kapalinu ke kontinuální analýze aerosolových částic (ACTJU). Měření depozice a chemického složení aerosolu v atmosféře je obvykle prováděno sběrem aerosolu na filtrech či tělech s následnou analýzou získaných částic. Tento postup sice zaznamenává data v průběhu času, ale dochází také ke vzniku nepřesností. Částice nasbírané na filtrech se totiž mohou vypařit během sběru, nebo může dojít k absorpci plynů. Filtry se dále musí promývat a časem dochází také k akumulaci vodou nerozpustných látek popřípadě i k desintegraci filtrů samotných. Desintegrace filtrů by pak mohla způsobit zachytávání vláken z filtrů v přístrojích.

ACTJU používá membránové pumpy k nasávání vzduchu do kolektoru z nerezové oceli. V tomto kolektoru je nasáty vzduch veden přes Venturiho trysky do kolizní komory. Uvnitř Venturiho trysek je kapilára z nerezové oceli vedoucí kapalinu (deionizovanou vodu). V kolizní komoře pak srážkou kapiček kapaliny a aerosolu dojde k zachycení aerosolu a tato směs je dále vedena do cyklony, ve které dojde k oddělení vzduchu a kapaliny. Výsledkem pak je, že ACJU je velmi vhodný aparát pro analýzu aerosolových částic při kontinuálním nastavením díky tomu, že má vysokou účinnost sběru částic, malý mrtvý objem a jednoduchou údržbu.

**Kerstin Lahnstein a spol.** [6] studovali plicní absorpci aerosolu fluorescenčních sond, jako modelu léčiva v izolovaných plicích králíka. Jako hlavní model léčiva byl použit 5(6)-carboxyfluorescein (CF). Depozice aerosolu pak závisela na proudění aerosolových částic, velikosti částic a frekvenci dýchání. Plicní absorpce byla ovlivňována různými fyzikálně-chemickými a biologickými faktory, včetně velikosti molekul, pH roztoku léčiva a lipofility. CF tedy byla experimentálně vyhodnocena, jako nelepší model léčiv díky rychlé, vysoké a reprodukovatelné absorpci, stabilní koncentraci v perfúzátu, která je nezávislá na tlaku v licích, cévnímu prosakování či edému.

**František Lízal a spol.** [7] se zaměřují na výzkum přepravy a depozice aerosolu v modelu 7 generace větvení dýchacích cest člověka. Pro výzkum byly použity dva modely. První z tenkovrstvého průhledného silikonu umožňující měření rychlosti a velikosti částic za pomoci fázově dopplerovského anemometru (PDA). Druhý model je pak určen pro měření depozice částic Obr. 5. Výsledky PDA měření jsou, že intenzita kolísání rychlosti je vyšší při výdechu vzhledem k směřování proudění vzduchu z bočních větví, a dále bylo také prokázáno, že rychlostní profily (dráhy) jsou velmi závislé na geometrii ale méně závislé na dýchání.



*Obrázek 5: Model plic 7 generace větvení*

Ke stanovení depozice byl použit zprvu DEHS (obal) a fluorescein (jádro) a poté bylo použito NaCl místo fluoresceinu. Depozice aerosolu byla měřena pro různé velikosti částic a pro různé průtoky. Stanovení bylo provedeno pomocí luminiscenční spektrofotometrie. K vysoké depozici částic pak došlo u částí 13 až 22, což mohlo být také způsobeno tím, že plocha těchto částí je větší a poslední části také obsahují více bifurkací. Dalším důvodem může být, že jsou zmíněné části vyrobeny z jiného materiálu než zbytek modelu, aby se předešlo této možnosti při dalších experimentech, byl vyroben celý model ze stejného materiálu.

Přestože je DEHS používán jako nosič fluorescenčního jádra popřípadě NaCl, jeho luminiscenční vlastnosti nebyli zaznamenány a tato práce je tedy hlavně zaměřena na spektrální charakterizaci DEHS a možné využití luminiscence DEHS pro analýzu depozice aerosolových částic.

## 3 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

### 3.1 Použité chemikálie

DEHS (bis(2-ethylhexyl)dekandioát)	Fluka GmbH, CAS: 122-62-3, čistota 97 %, šarže 0001392821
isopropylalkohol (IPA)	Lachner s.r.o., CAS: 67-63-0, čistota 99 %, šarže 30703
ethanol	Sigma-Aldrich s.r.o., CAS: 64-17-5, čistota 99,8 %, šarže 1240658
methanol	Sigma-Aldrich s.r.o., CAS: 74-82-8, čistota 99,8 %, šarže 4271B
DMSO (dimetylsulfoxid)	Sigma-Aldrich s.r.o., CAS: 67-68-5, čistota 99 %, šarže 1223960
cyklohexan	Sigma-Aldrich s.r.o., CAS: 110-82-7, čistota 99 %, šarže 1305483
xylén	Fluka GmbH, CAS: 95-47-6, čistota 98 %, šarže 1540236
chloroform	Sigma-Aldrich s.r.o., CAS: 67-66-3, čistota 99,8 %, šarže 1390741

### 3.2 Příprava vzorků a jejich měření

#### 3.2.1 Spektrální charakterizace DEHS :

Nejprve byl sledován vliv různých prostředí na spektrální vlastnosti roztoku DEHS a to pro tato prostředí: DMSO, methanol, IPA, cyklohexan, xylén a chloroform. Pro každý roztok bylo ve vialkách rozpuštěno 0,5 ml DEHS v 4,5 ml příslušného rozpouštědla. Takto byla připravena sada pro nedegradovaný DEHS a sada pro degradovaný DEHS. Následně byly provedeny excitační a emisní skeny na fluorimetru AMINCO Bowman Series 2, pro zjištění excitačního a emisního maxima.

*Tabulka 1: Nastavení fluorimetru AMINCO Bowman Series 2*

DEHS	monochromátory: ex/em (bandpass)	
nedegradovaný	295/320	8/8
degradovaný	370/420	8/8

#### 3.2.2 3D skeny DEHS ve vybraných prostředích

Pokračováním spektrální charakterizace bylo vytvoření 3D spekter v programu Origin, abychom měli lepší přehled o chování DEHS v rozpouštědlech, čímž bychom mohli najít nejideálnější prostředí pro další experimenty. 3D skeny byly provedeny pro čistý DEHS a roztoky DEHS v: xylenu, methanolu, ethanolu, chloroformu, cyklohexanu a IPA. Pro měření čistého DEHS bylo napipetováno do vialky 5 ml DEHS. Ve vialkách bylo rozpuštěno 0,5 ml DEHS v 4,5 ml příslušného rozpouštědla. Takto připravené vzorky, byly míchány po dobu 24 h. Po ukončení míchání, byly provedeny 3D skeny podle následujícího nastavení: ve 3D

skenu byl nastaven emisní sken v rozmezí 250-600 nm s krokem 10 nm, excitační sken v rozmezí 250-500 nm s krokem 5 nm, bandpass 8/8, emisní a excitační polarizátory byly nastaveny tak, aby svíraly úhel 90° a citlivost byla uvolena dle intenzity fluorescence.

### **3.2.3 3 Stabilitní testy pro DEHS:**

Byl sledován vliv času a podmínek na spektrální vlastnosti roztoků DEHS pro čistý DEHS a jeho roztoky v IPA o koncentracích 152,3 g<sup>-1</sup>, 18,28 g<sup>-1</sup>, 182,8 g<sup>-1</sup>. Vzorky byly uchovány v lednici při 4 °C a při laboratorní teplotě 25 °C a vzorky o koncentraci 18,28 g<sup>-1</sup> a 182,8 g<sup>-1</sup> byli mícháni na třepačce při laboratorní teplotě 25 °C. Vzorky byly uchovávány v uzavíratelných skleněných vialkách. U vzorků byly měřeny emisní skeny a to ihned po přípravě a poté v časových úsecích 2 hod, 4 hod, 24 hod, 3, 4, 7, 8, 9, 11, 14, 16, 18, 21, 23, 25, 28, 35, 42, 49 a 66 den.

Byly prováděny dva emisní skeny pro každý vzorek s nastavením bandpass 8/8, emisní a excitační polarizátory byly nastaveny tak, aby svíraly úhel 90° a citlivost detektoru byla regulována podle intenzity fluorescence. První sken byl prováděn s nastavením excitačního monochromátoru na 295 nm. Druhý sken měl excitační monochromátor nastaven na 370 nm.

### **3.2.4 4. IČ spektra DEHS:**

Byl předestilován DEHS za sníženého tlaku, čímž byl získán čistý a nedegradovaný DEHS. Následně byly provedeny skeny na IČ spektrometru FT-IR spektrometr Nicolet Impact 400 za použití ATR krystalu pro roztoky: nedegradovaný DEHS, degradovaný DEHS, IPA, degradovaný DEHS v IPA a nedegradovaný DEHS v IPA. Nastavení IČ spektrometru bylo: počet skenů 256, byl použit ATR krystal, který má cut-off 800.

### **3.2.5 3D skeny pro nedegradovaný a degradovaný DEHS**

Za pomoci programu Origin byly zhotoveny 3D skeny pro nedegradovaný DEHS a degradovaný DEHS, abychom získali spektrální charakterizaci pro oba DEHS, což by nám mohlo pomoci pro pochopení luminiscence DEHS. Měření bylo prováděno pro: nedegradovaný DEHS, degradovaný DEHS, nedegradovaný DEHS v IPA, degradovaný DEHS v IPA, nedegradovaný DEHS v xylenu, degradovaný DEHS v xylenu. Vzorky byly připraveny následujícím způsobem. Pro měření čistého DEHS byly odpipetováno do vialky 3 ml DEHS. Ve vialkách bylo 1 ml DEHS v 2 ml příslušného rozpouštědla. Roztoky byly ponechány na třepačce po dobu 24h a po ukončení míchání, byly provedeny 3D skeny podle následujícího nastavení: ve 3D skenu byl nastaven emisní sken v rozmezí 250-600 nm s krokem 10 nm, excitační sken v rozmezí 250-500 nm s krokem 5 nm, bandpass 8/8, emisní a excitační polarizátory byly nastaveny tak, aby svíraly úhel 90° a citlivost byla uvolena dle intenzity fluorescence.

## **3.3 Metody měření**

### **3.3.1 Fluorescence**

Ve všech případech měření byly vialky uzavřeny a ponechány protřepávat do příslušné doby. Po uplynutí příslušné doby byly sejmuty vialky z třepačky a bylo provedeno jejich měření na luminiscenčním spektrometru AMINCO Bowman Series 2. Měření bylo vždy prováděno při laboratorní teplotě 25,0 ± 0,1 °C. Stálá teplota byla udržována v místnosti pomocí klimatizace. Veškerá měření byla prováděna se zapojením polarizátoru pro omezení vlivu lampy. Detailní nastavení jsou popsána u daných měření.



### 3.3.2 FT-IR spektroskopie

Infračervená spektrometrie je metoda, založená na měření absorpce infračerveného záření o různé vlnové délce analyzovaným materiálem. Infračerveným zářením se rozumí elektromagnetické záření s rozsahem vlnových délek  $\lambda$  0,78 – 1000  $\mu\text{m}$ , což odpovídá rozsahu vlnočtů 12800 – 10  $\text{cm}^{-1}$ . Celá oblast bývá rozdělena na blízkou (13000 – 4000  $\text{cm}^{-1}$ ), střední (4000 – 200  $\text{cm}^{-1}$ ) a vzdálenou infračervenou oblast (200 – 10  $\text{cm}^{-1}$ ), přičemž nejpoužívanější je střední oblast.

Metoda využívá absorpce infračerveného záření při průchodu vzorkem, při které dochází ke změnám rotačně vibračních energetických stavů molekuly v závislosti na změnách dipólového momentu molekuly. Analytickým výstupem je infračervené spektrum, které je grafickým zobrazením funkční závislosti energie, většinou vyjádřené v procentech **transmittance**  $T$  nebo jednotkách **absorbance**  $A$  na vlnové délce  $\lambda$  dopadajícího záření. Transmittance (propustnost) je definována jako poměr intenzity záření, které prošlo vzorkem, k intenzitě záření vycházejícího ze zdroje.

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (4)$$

$$A = -\log \frac{I_0}{I} = \log \frac{1}{T} \quad (5)$$

kde  $I_0$  je původní světelný tok a  $I$  zeslabený světelný tok vystupující z ozářené látky [14]  
Použité nastavení je pak popsáno v 3.2.4.

## 4 VÝSLDEKY A DISKUZE

### 4.1 Spektrální charakterizace DEHS :

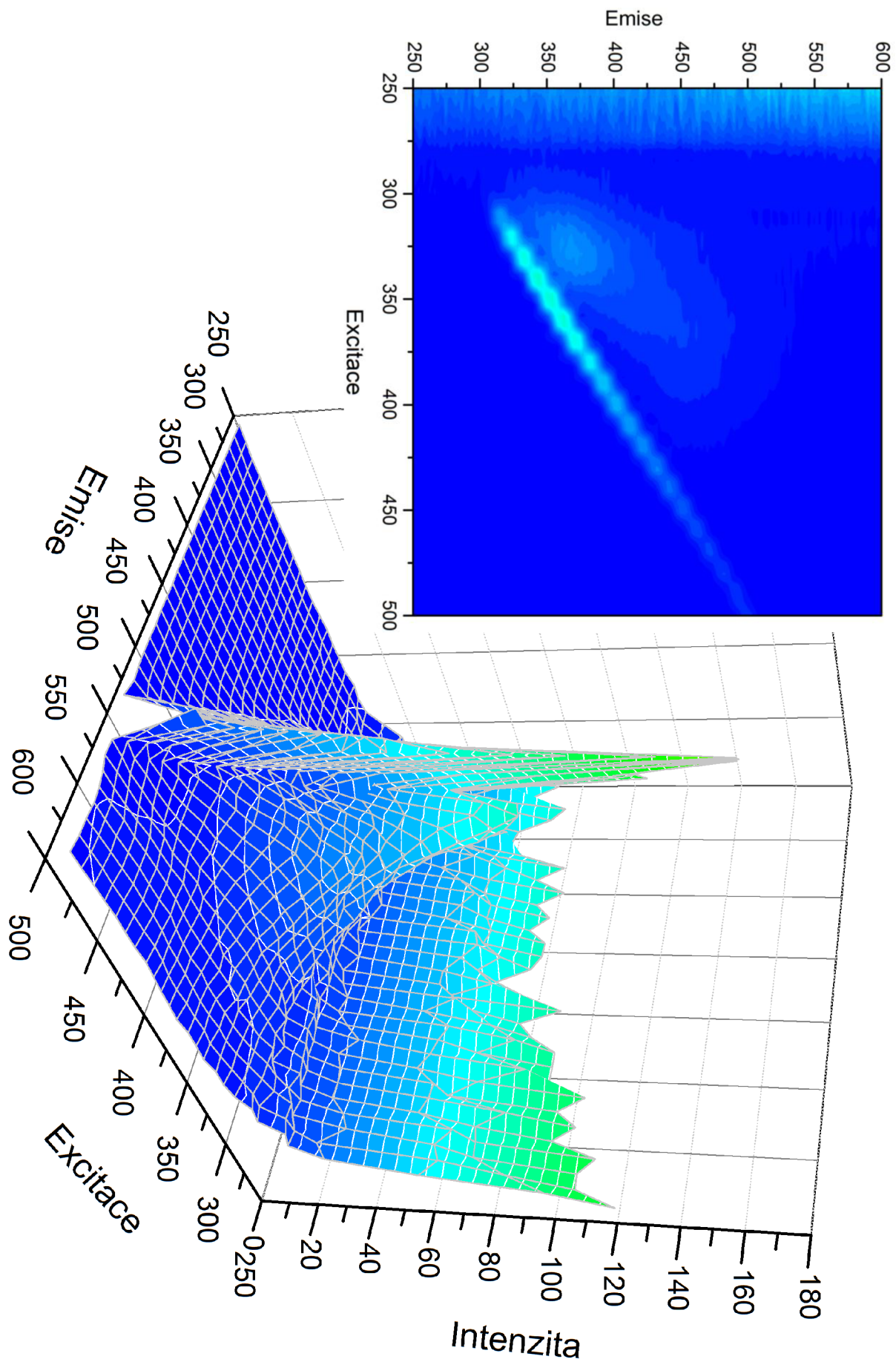
*Tabulka 2: Výsledná maxima*

DEHS	Prostředí	EX. Max (nm)	EM. Max (nm)
nedegradovaný	IPA	295	330
degradovaný		370	430
nedegradovaný	methanol	295	330
degradovaný		370	430
nedegradovaný	xylen	285	330
degradovaný		320	390
nedegradovaný	DMSO	295	330
degradovaný		295	330
nedegradovaný	cyklohexan	nerozpuštěno	
degradovaný		285	330
nedegradovaný	chloroform	370	430
degradovaný		295	340
nedegradovaný	chloroform	330	400
degradovaný		330	400

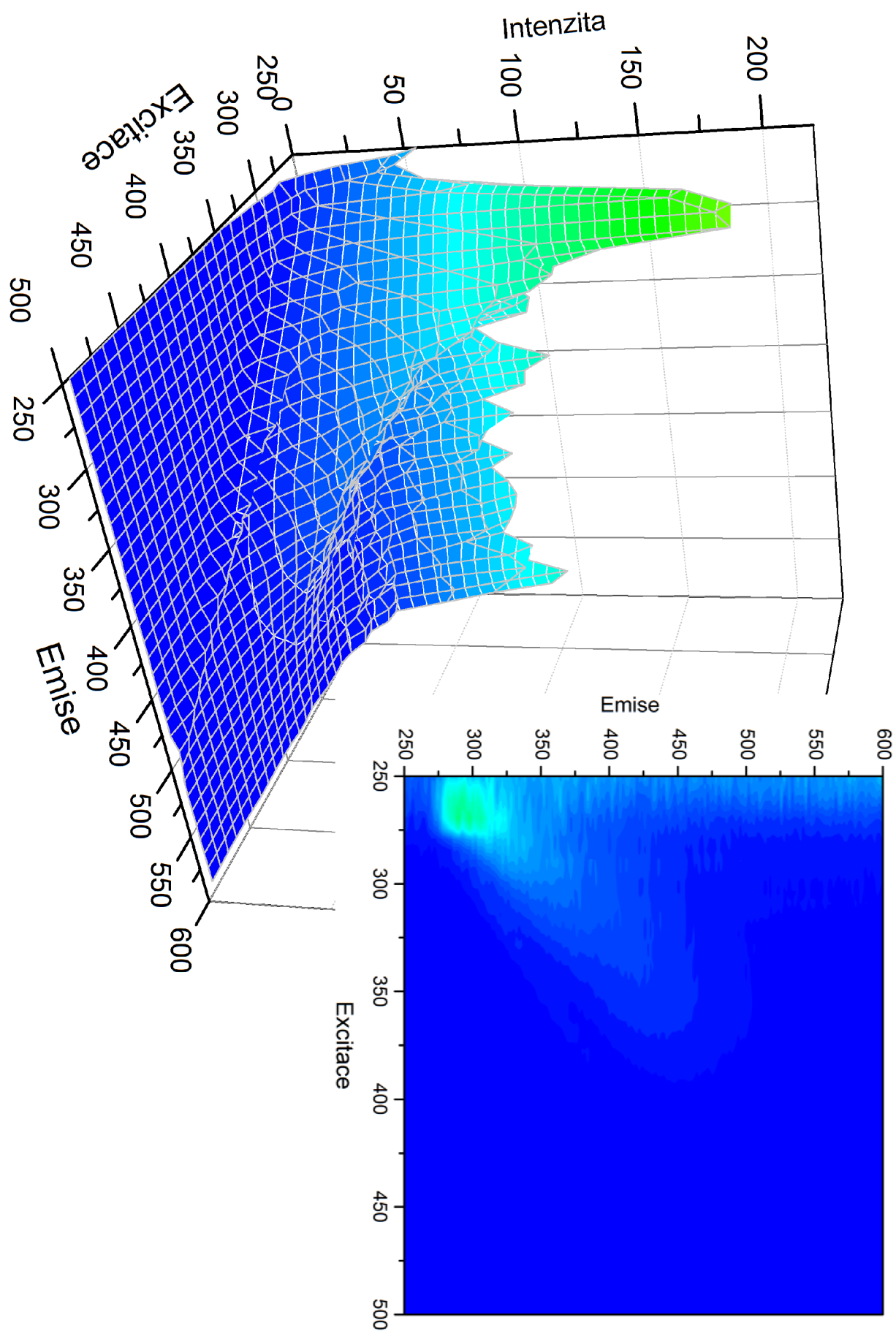
Vzhledem k vysrážení DEHS v DMSO nebylo možné změřit emisní spektrum. DEHS dosahoval nejvyšší intenzity fluorescence v IPA a v ethanolu. DEHS v xylenu a chloroformu měl nejnižší intenzitu. Polohy maxim excitace a emise DEHS v různých prostředích se příliš nelišily, k největším změnám došlo u degradovaného DEHS v methanolu (posun emisního maxima o 40 nm) a chloroformu (posun emisního maxima o 30 nm).

### 4.2 3D skeny DEHS ve vybraných prostředích

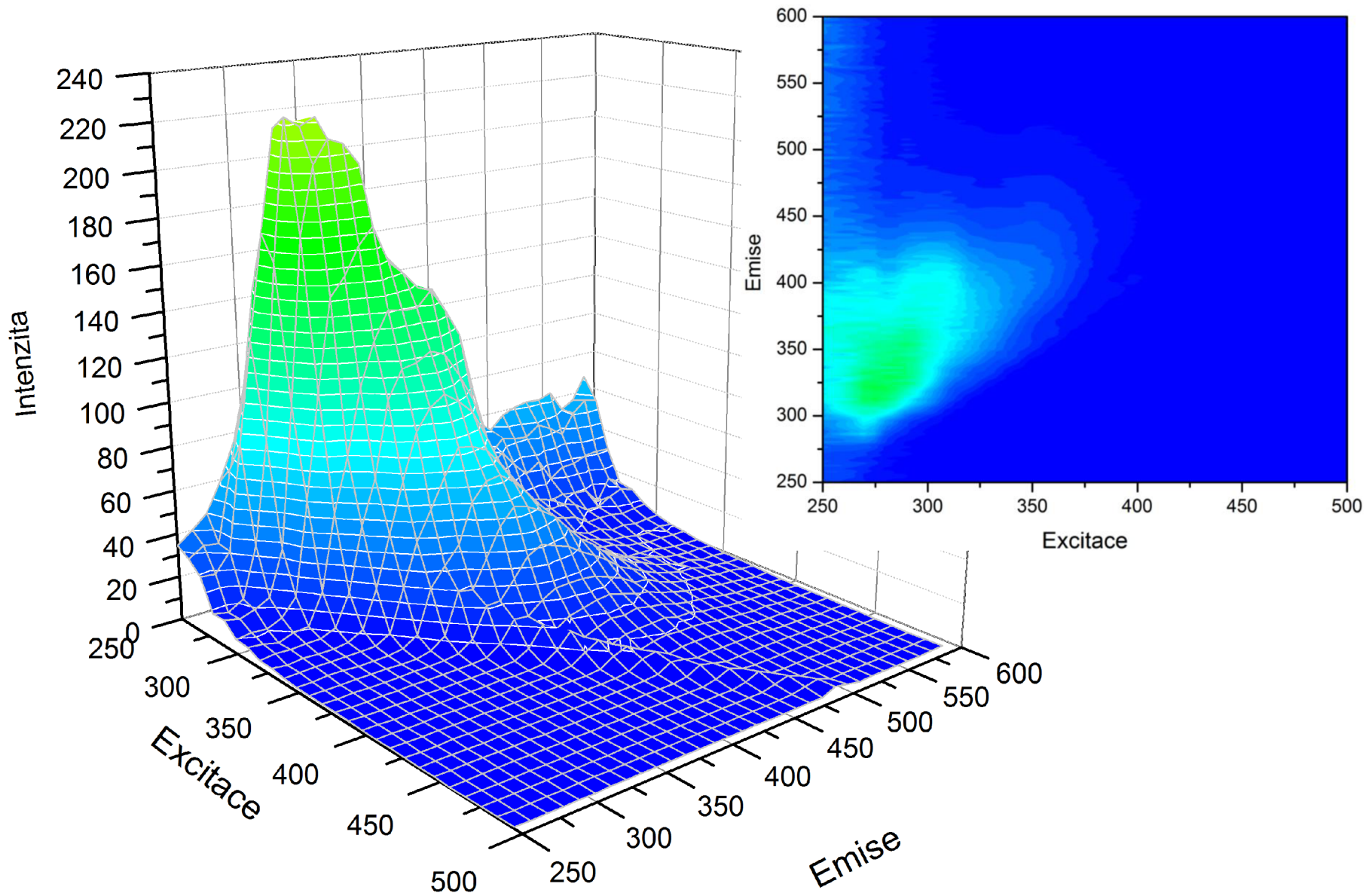
Na 3D skenech (Obr. 6 až 11) můžeme vidět polohy emisních a excitačních maxim, které naznačují posun k nižším vlnovým délkám v prostředích, která mají hydroxylové skupiny jako je izopropylalkohol, ethanol a methanol. V prostředí IPA dochází k detekci vyšší intenzity fluorescence oproti čistému DEHS. V methanolu i ethanolu je pak intenzita fluorescence srovnatelná s čistým DEHS. K mírnému posunu excitačního maxima k vyšším vlnovým délkám došlo v případě xylenu a chloroformu avšak v těchto prostředích došlo k rapidnímu poklesu intenzity fluorescence oproti čistému DEHS. Díky zvýšení intenzity fluorescence DEHS v IPA byl IPA vybrán jako nejvhodnější prostředí pro další experimenty.



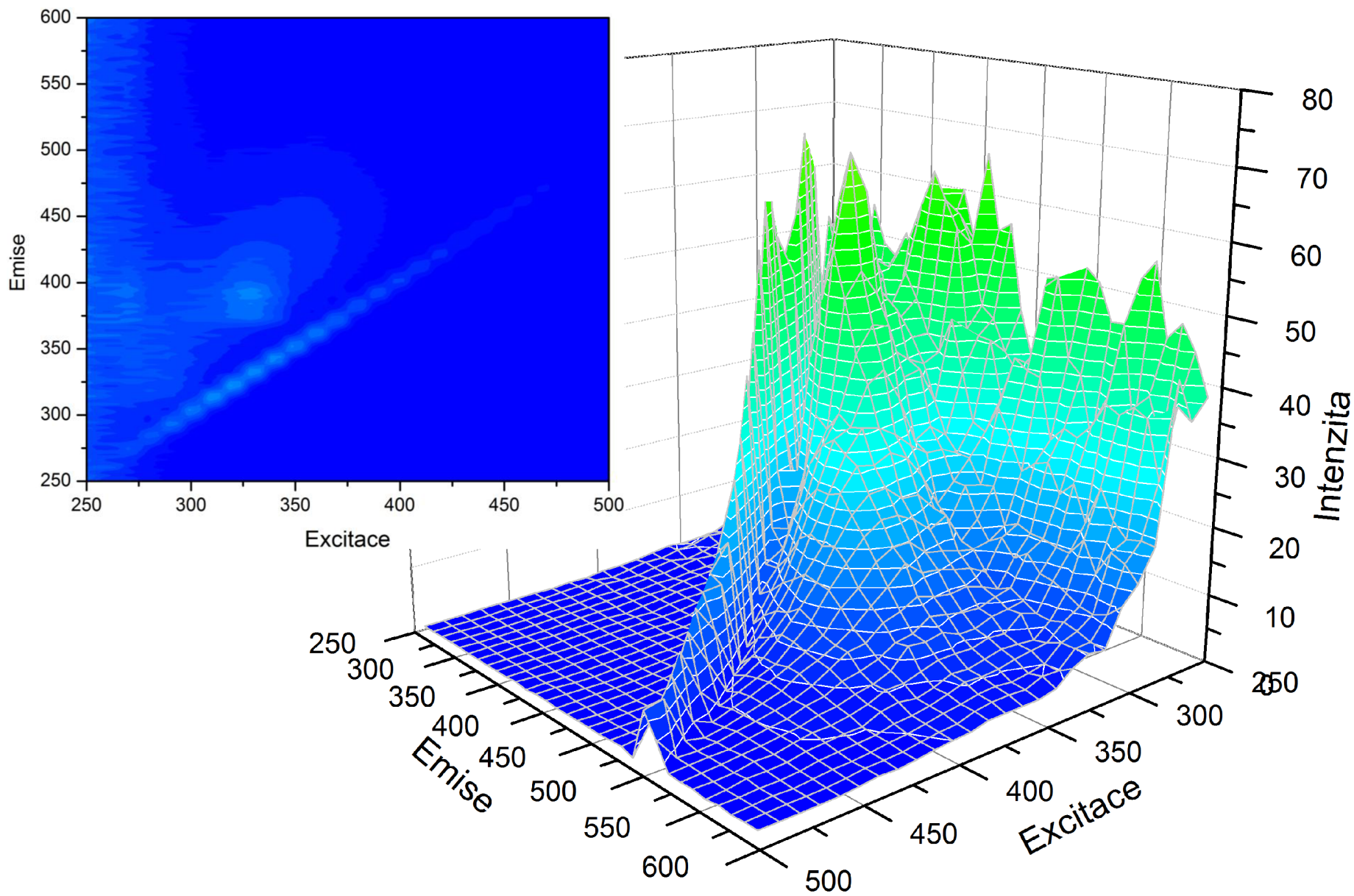
Obrázek 6: 3D sken a profil DEHS v xylenu



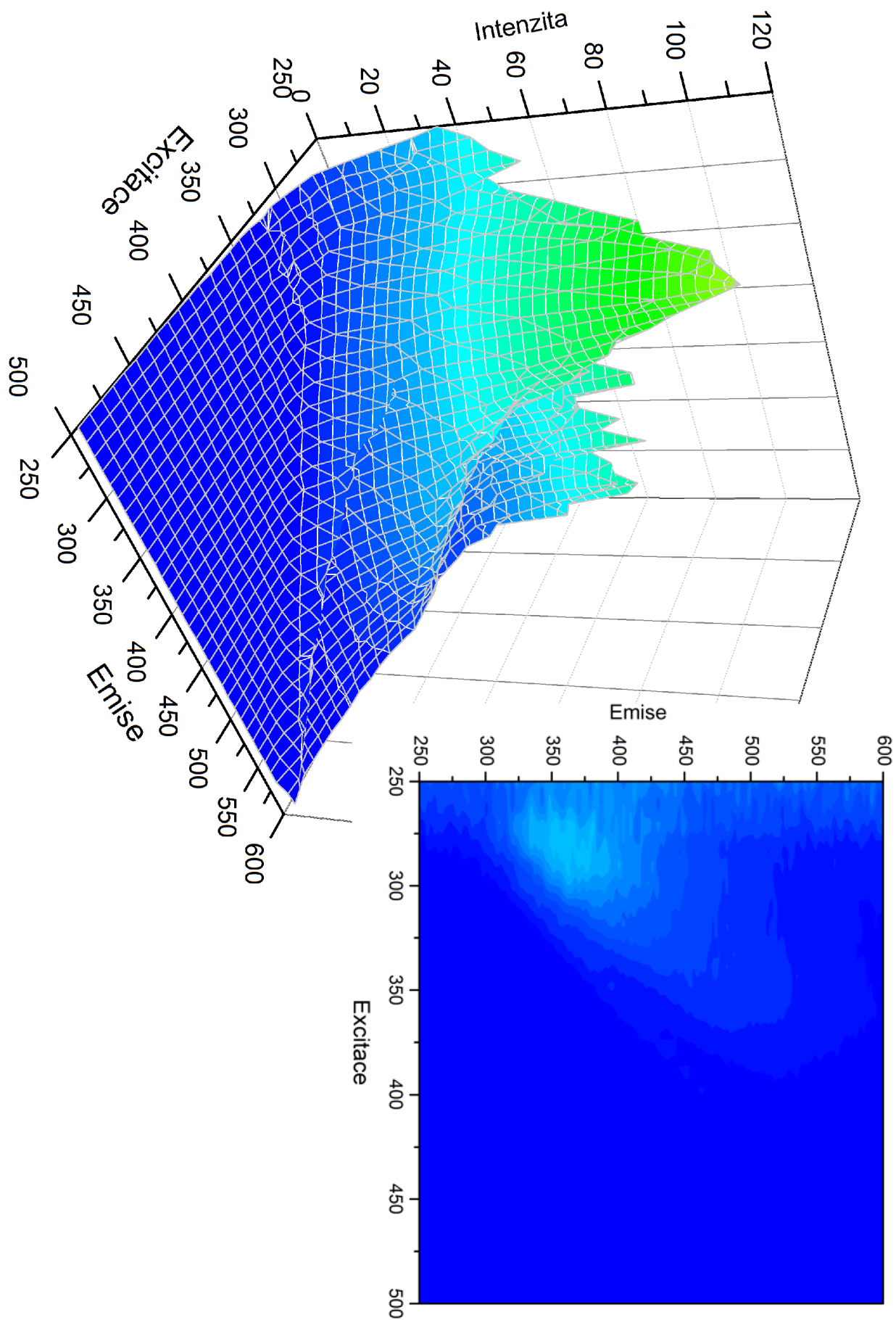
Obrázek 7: 3D sken a profil DEHS v methanolu



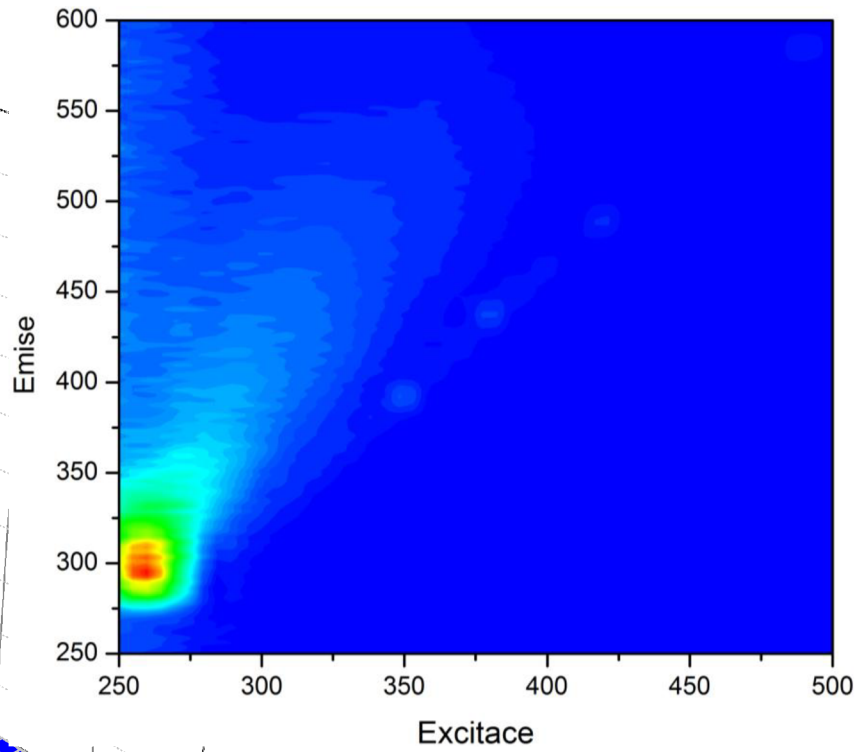
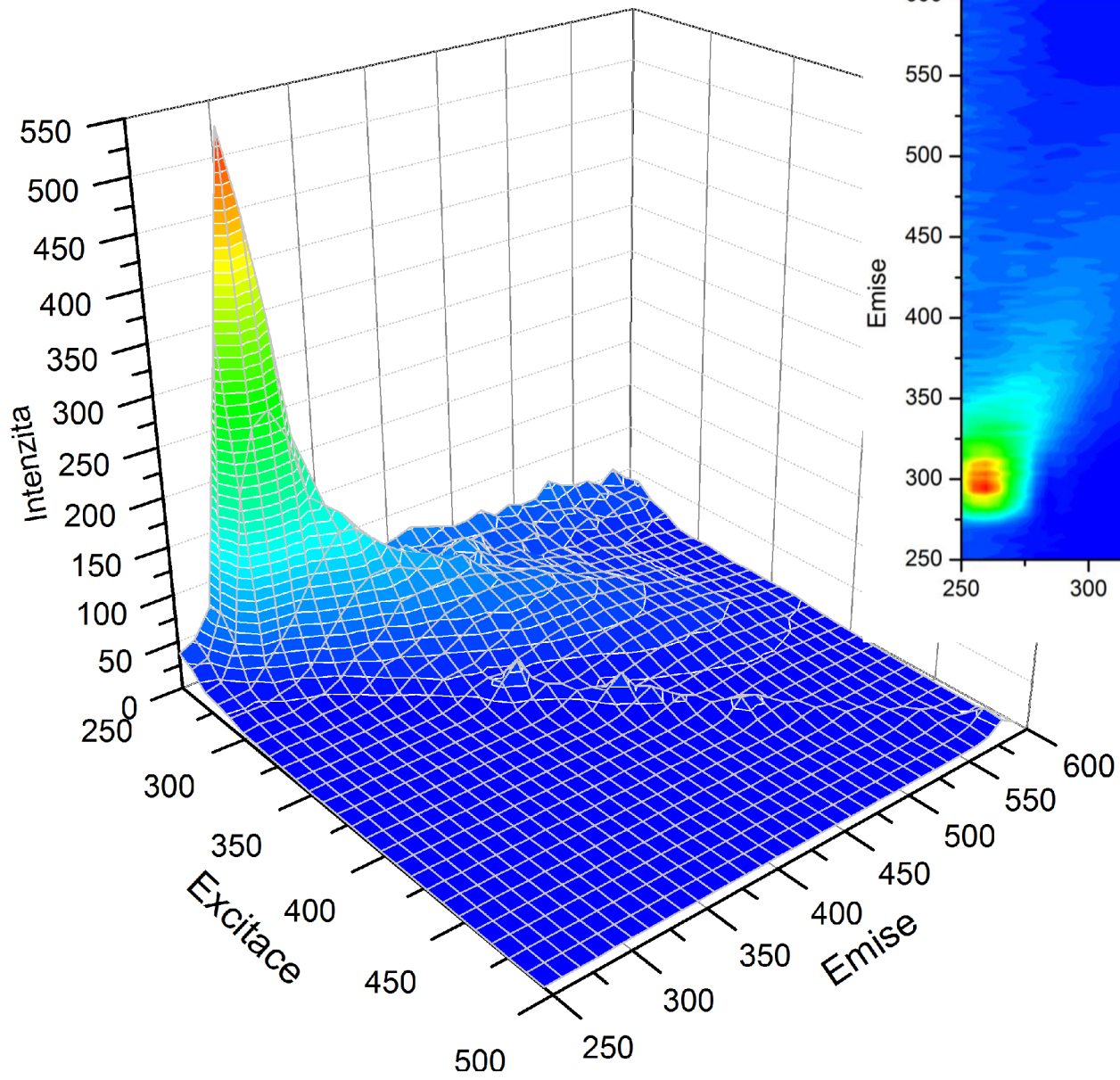
Obrázek 8: 3D sken a profil DEHS v ethanolu



Obrázek 9: 3D sken a profil DEHS v chloroformu

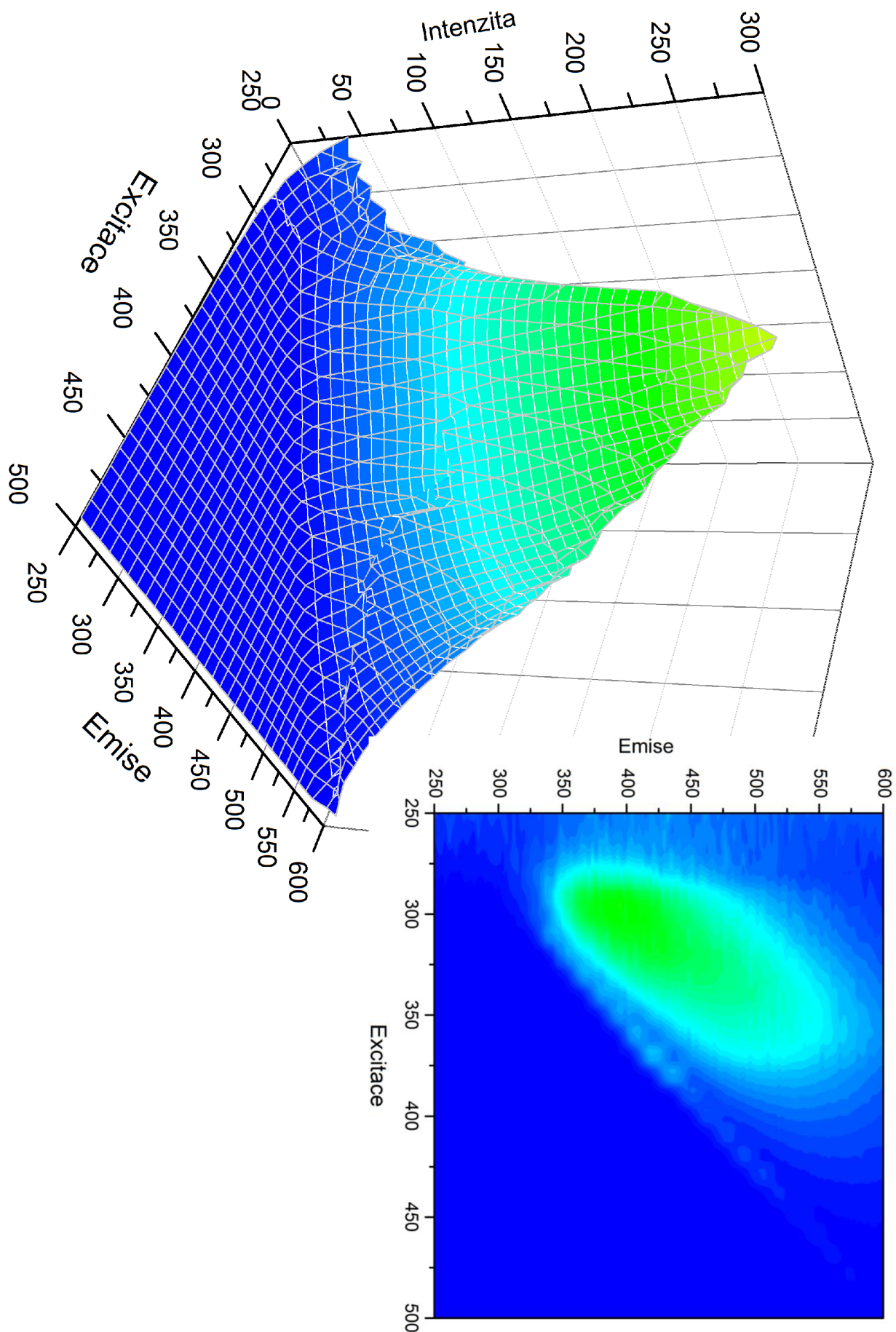


Obrázek 10: 3D sken a profil DEHS v cyklohexanu



Obrázek II: 3D sken a profil DEHS v IPA





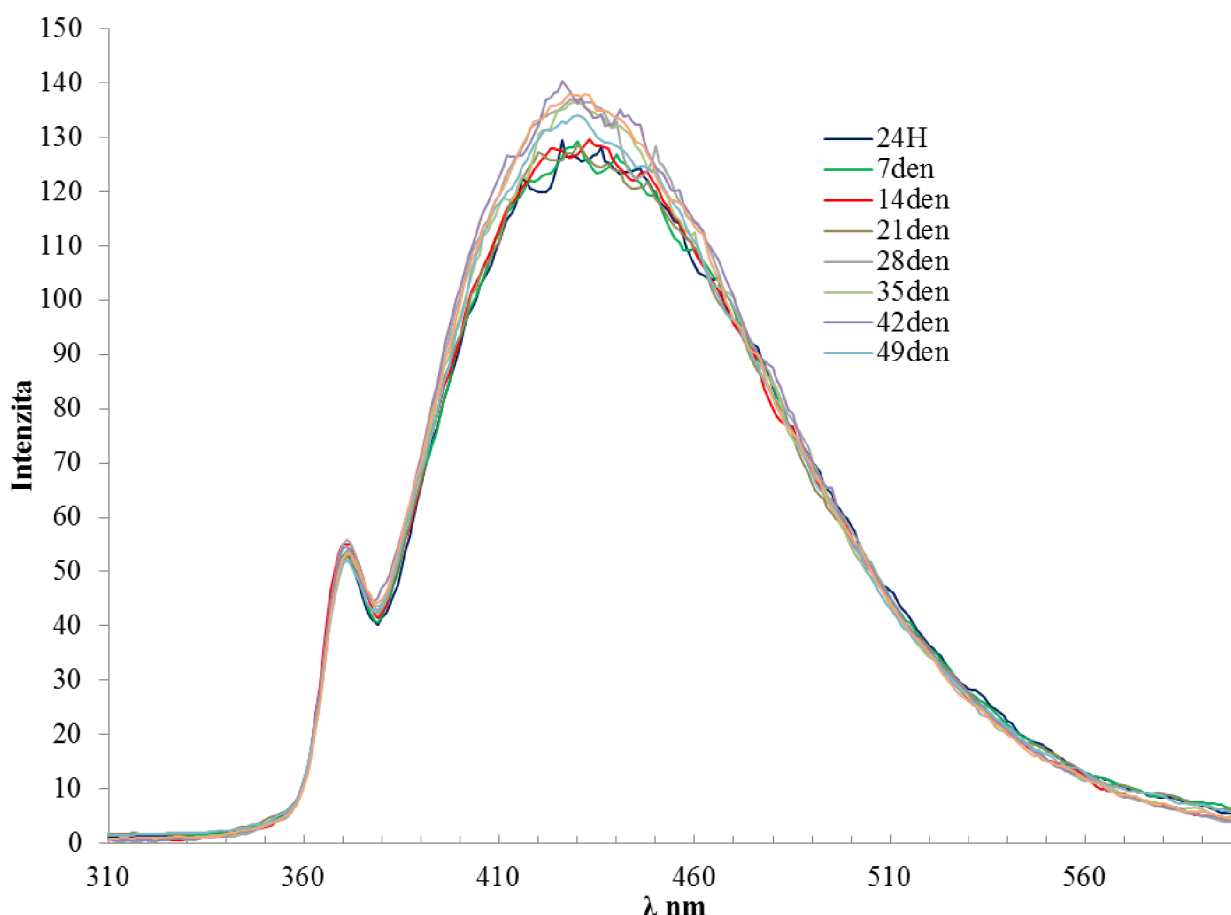
Obrázek 12: 3D sken a profil DEHS

### 4.3 Stabilitní testy pro DEHS:

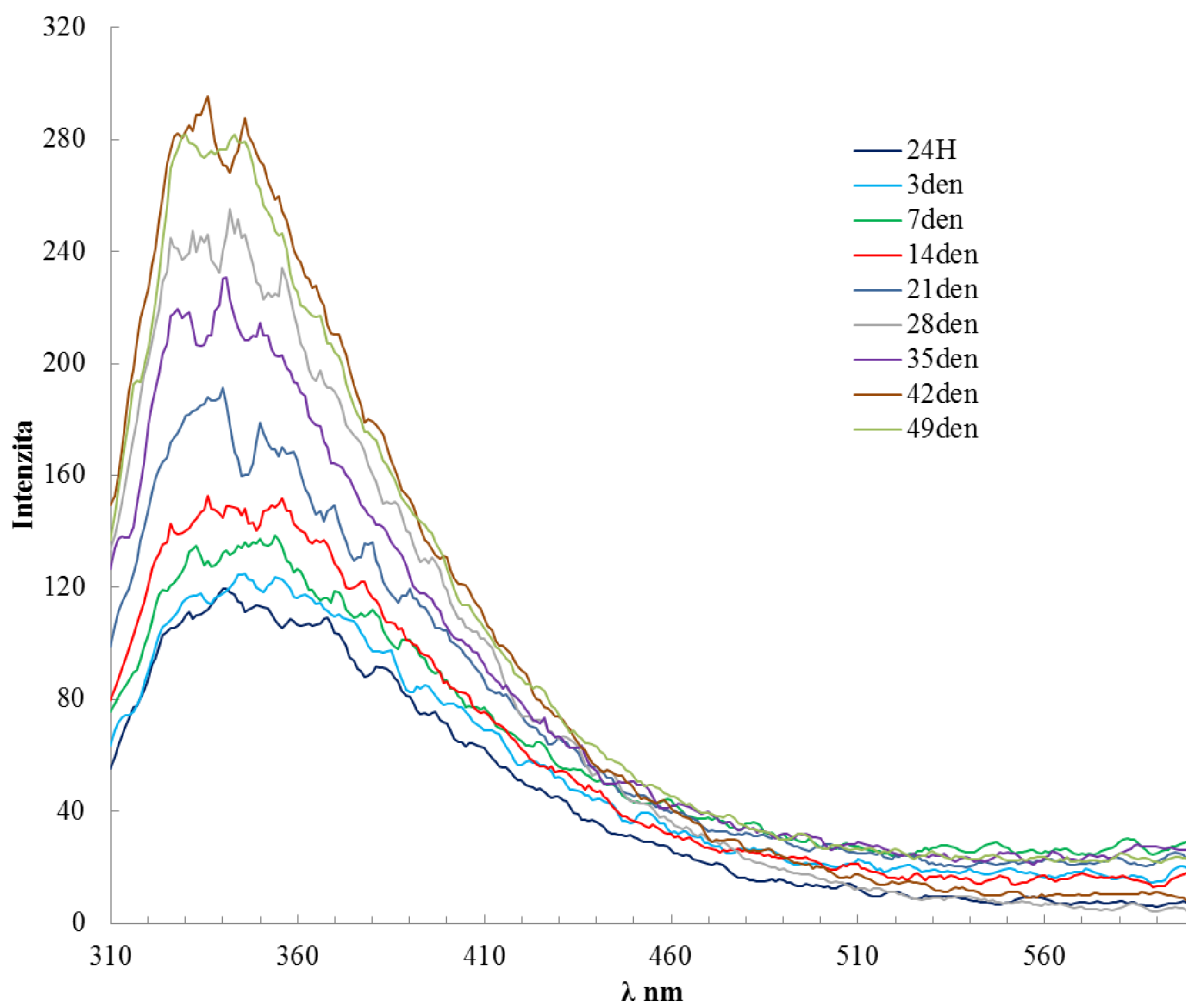
V grafech (Obr. 13 a 14) je možné sledovat trend růstu intenzity s časem, a tudíž je možné se domnívat, že dochází k pomalému rozpouštění DEHS v izopropylalkoholu nebo k vzájemné interakci. Prudký nárůst v intenzitě naměřené po 14 dnech by bylo možné vysvětlit tím, že například došlo ke změření nerozpuštěného DEHS, čemuž by odpovídala intenzita i tvar výsledného spektra.

Vzorek o koncentraci  $182,8 \text{ g} \cdot \text{l}^{-1}$  DEHS v IPA nebyl po dobu 18 dnu plně homogenní, tudíž by bylo lepší použít jinou metodu míchání k přípravě dalších roztoků o vysoké koncentraci. Například použitím výkonnějšího ultrazvuku nebo přímou přípravou z aerosolu. Při posledních měřeních bude chyba z důsledku pomalého odpařování roztoku i v uzavřené vialce, takže při posledních měření zbylo minimum vzorku. Týká se to hlavně vzorků, které byly míchány za laboratorní teploty, čistý DEHS se tolik neodpařoval, spíše se ztrácí z důsledků jeho poměrně vysoké viskozity - používal jsem stále ten samý vzorek.

Vzorek DEHS, který byl udržován při teplotě  $4 \text{ }^\circ\text{C}$  v ledničce prokázal minimální nárůst intenzity fluorescence jak je patrné na Obr. 13. Na Obr. 14 je pak vidět typický nárůst intenzity fluorescence v čase, což by mohlo znamenat, že dochází k pozvolnému rozpouštění DEHS v IPA. Tomuto rozpouštění lze napomoci mechanickým mícháním.



**Obrázek 13:** Emisní sken pro vzorek o  $c = 182,8 \text{ g} \cdot \text{l}^{-1}$  při excitaci 370 nm

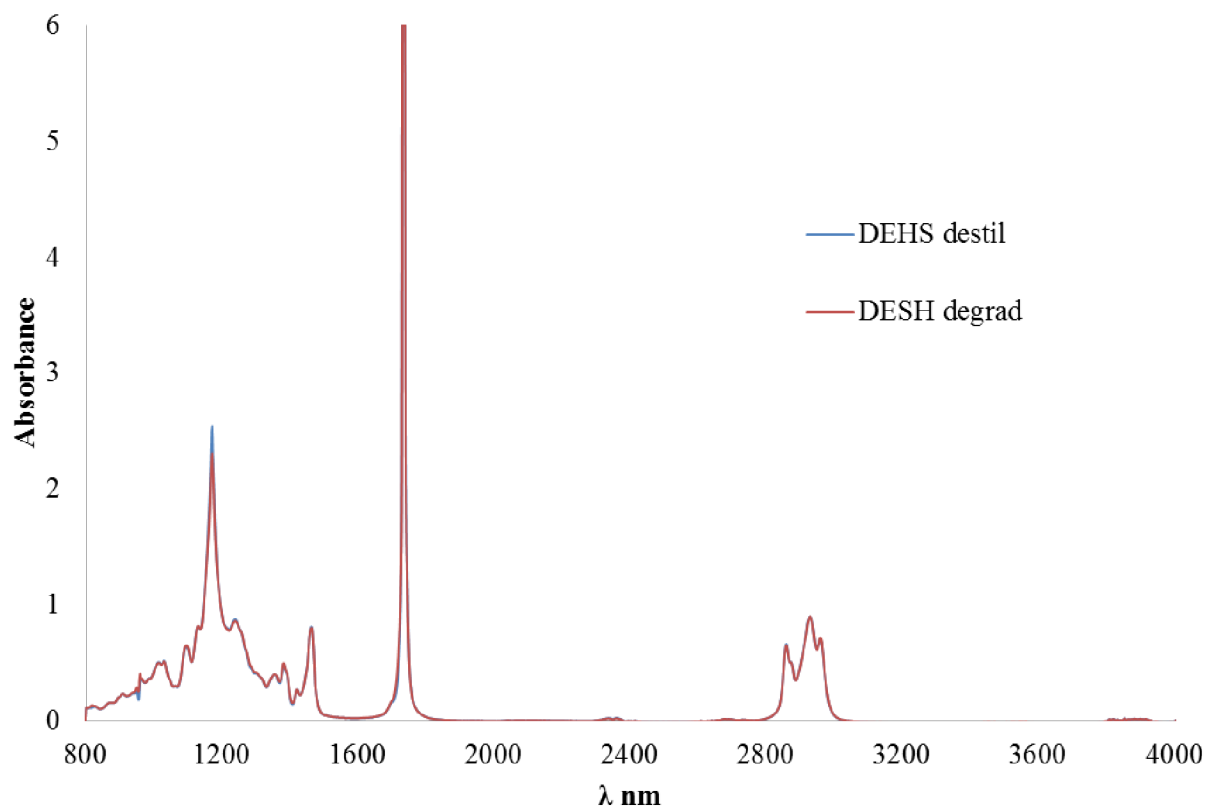


*Obrázek 14: Emisní sken pro vzorek o  $c = 152,3$  při excitaci 295 nm*

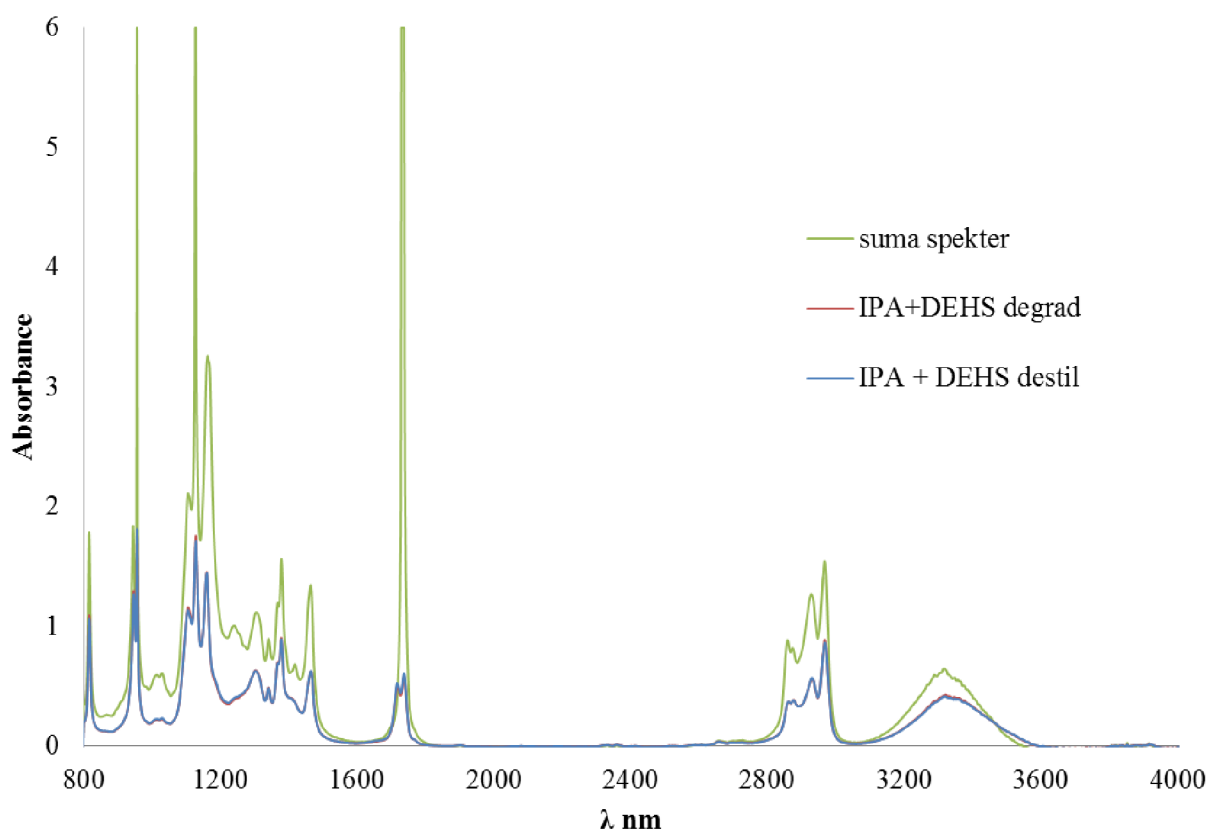
#### 4.4 IČ spektra DEHS:

Na následujících obrázcích (Obr. 15 a 16) je srovnání IČ spekter, ze kterých je vidět, že spektrum složené výpočtem ze spekter IPA a DEHS je stejné jako spektrum roztoku DEHS v IPA. Také degradovaný a nedegradovaný DEHS mají stejná spektra, což poukazuje na nemožnost rozlišit degradovaný DEHS od nedegradovaného za použití dané metody. Z výsledných IČ skenů lze konstatovat, že se v DEHS nenachází organické látky, které by způsobovaly fluorescenci. Kontaminace je pak možná pouze některými anorganickými látkami, jejichž IČ záření by mohl DEHS pohlcovat na takové úrovni, že nebylo možné za pomoci IČ spektroskopie určit stíněné látky. Pro určení kontaminace by bylo možné použít velmi zředěného vzorku vykazujícího fluorescenci (použití dodaných vzorků) na IČ spektrometru, použít plynovou chromatografii nebo hmotnostní spektrometrii.

Výsledky tedy ukazují na to, že je možná vzorek **nekontaminovaný** avšak z IČ spekter není možné určit interakci mezi DEHS a IPA která by se projevila vytvořením vazeb. Avšak z 3D skenů vyplývá, že dochází k nárůstu intenzity fluorescence v prostředí IPA, což naopak poukazuje na to, že se tedy musí docházet k nějakým interakcím.



**Obrázek 15:** IČ spektrum pro DEHS-překryv spekter



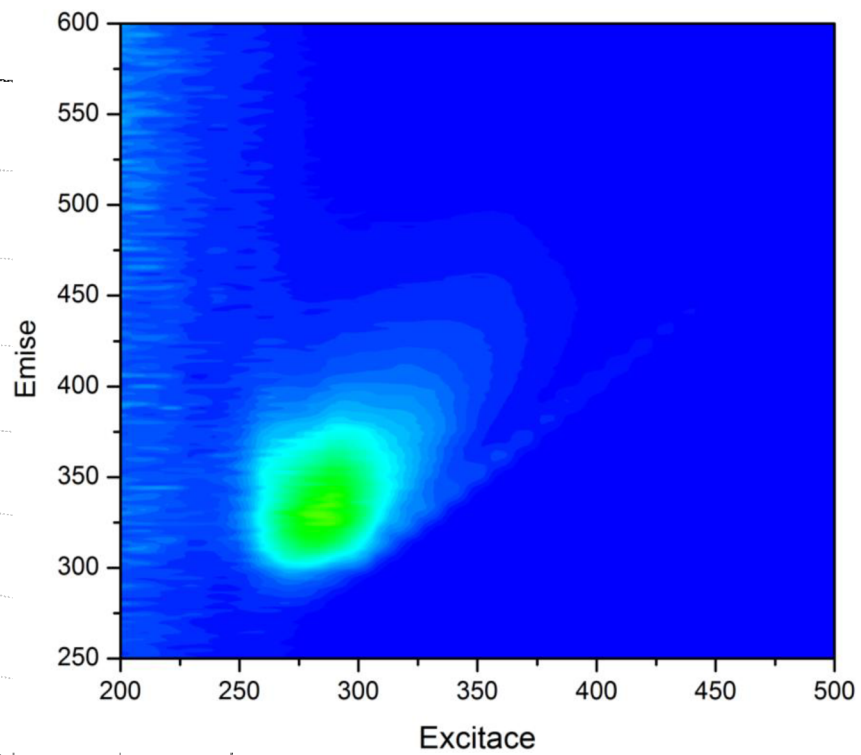
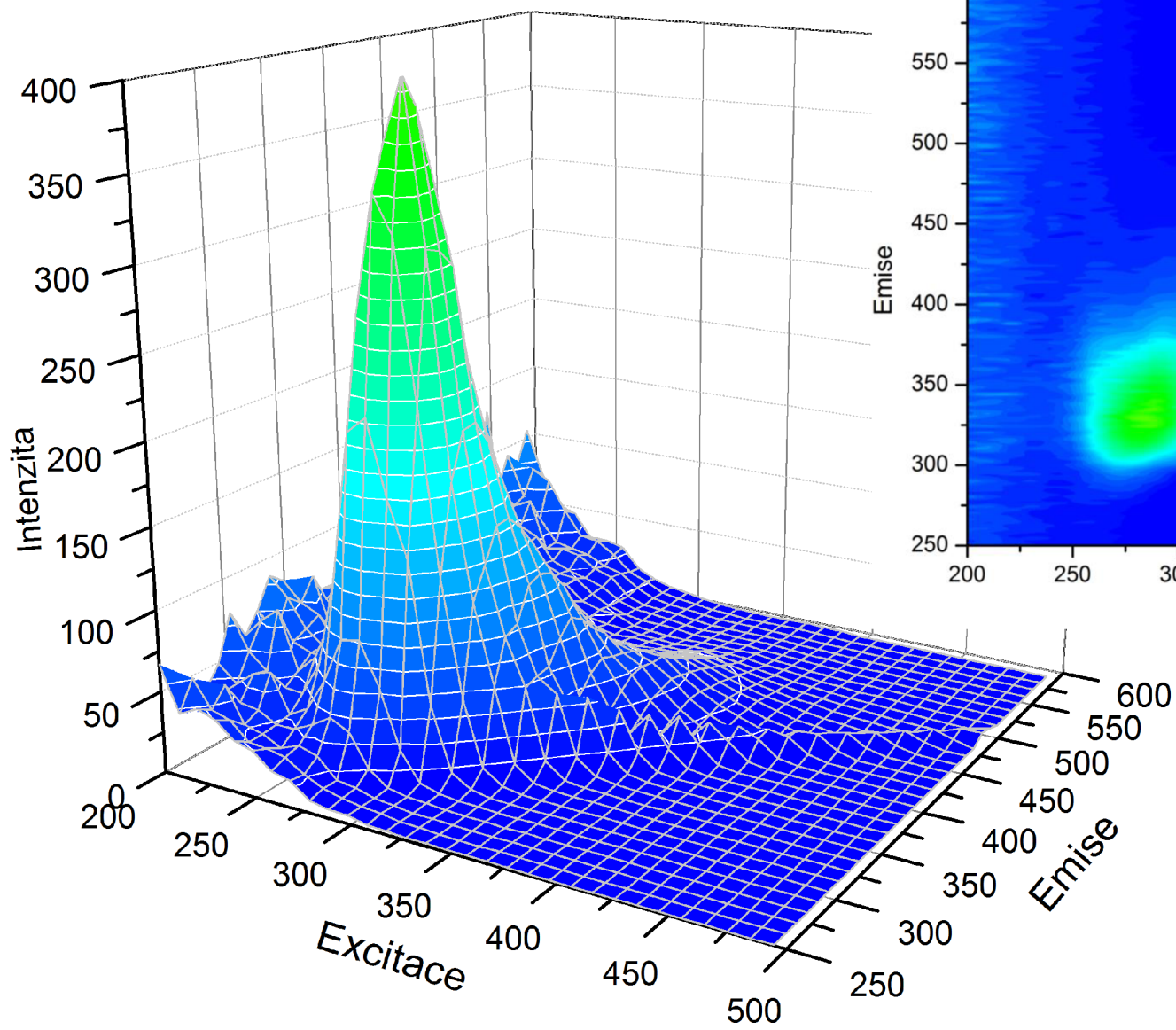
**Obrázek 16:** IČ spektrum IPA+DEHS-překryv spekter

#### 4.5 3D skeny pro nedegradovaný a degradovaný DEHS

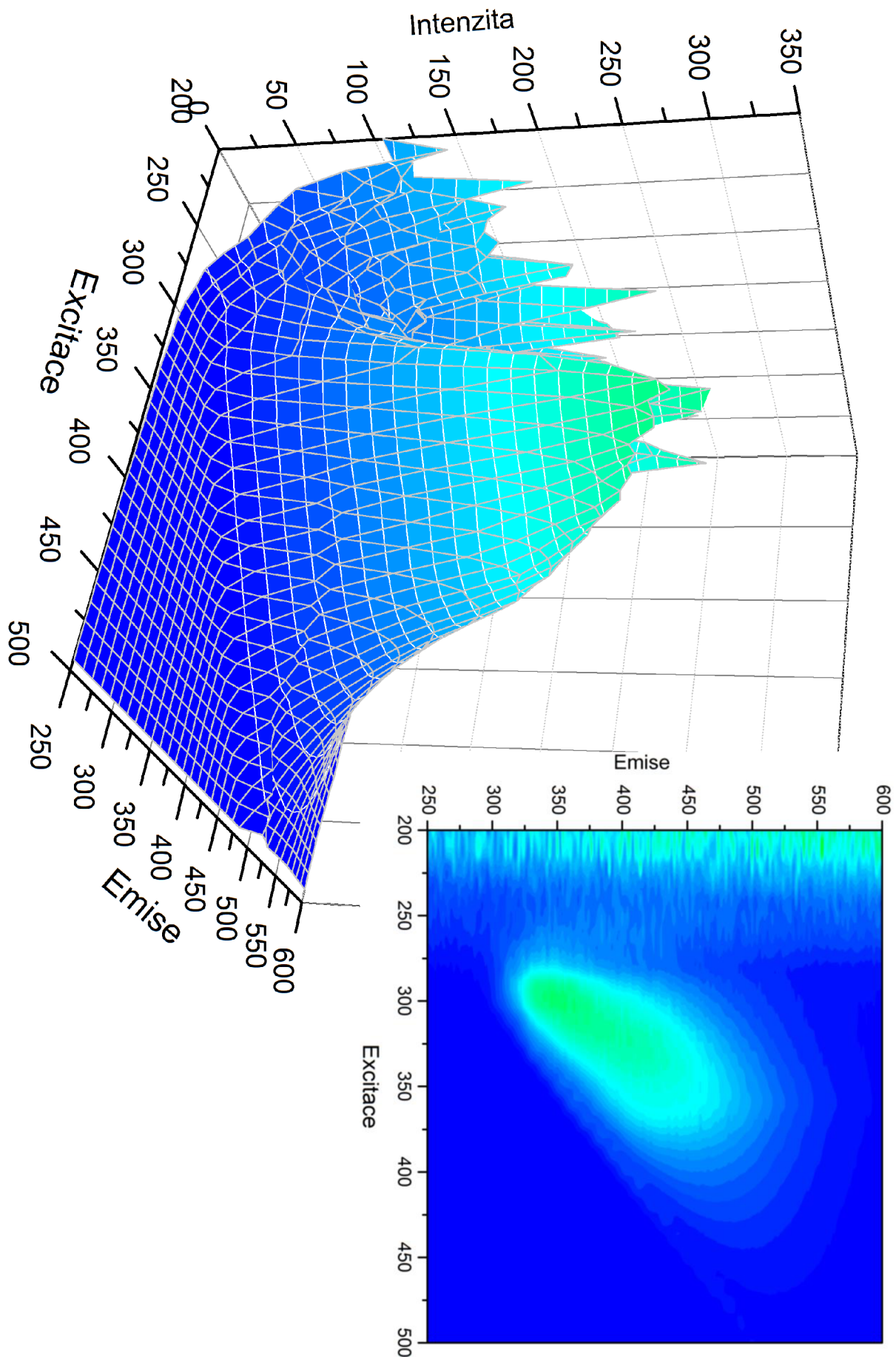
Na 3D skenech (Obr. 17 až 22) můžeme vidět polohy emisních a excitačních maxim, které naznačují posun k nižším vlnovým délkám v prostředí IPA a posun k vyšším vlnovým délkám v prostředí xylenu. Tato skutečnost již byla pozorována v bodě 4.2.

Z 3D skenů je možno vidět, že u degradovaného DEHS dochází k posunu excitační i emisní vlnové délky k vyšším vlnovým délkám a to jak pro čistý DEHS tak i pro DEHS v prostředích xylen a IPA. Nejvíce je tento efekt patrný u DEHS v IPA, kde je možno pozorovat snížení intenzity maxima a nárůstu intenzity při vyšších vlnových délkách, což je možné sledovat na profilech 3D skenů jako rozšíření oblasti intenzity. Rozšíření je možné pozorovat i v prostředí xylenu, který značně utlumuje intenzitu fluorescence DEHS. Posun k vyšším vlnovým délkám a snížení intenzity fluorescence pak může být způsoben samotnou degradací DEHS.

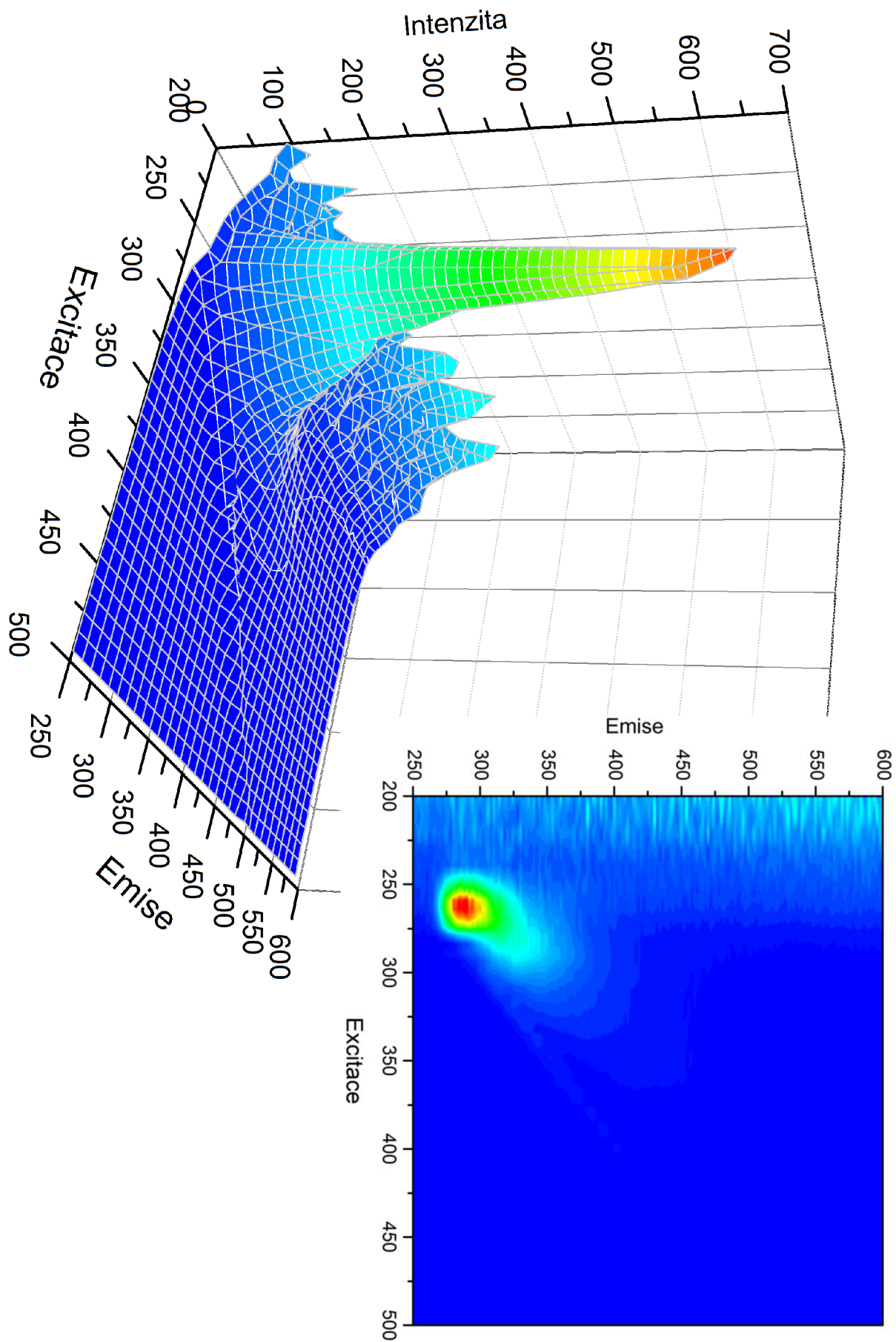
Tímto experimentem je tedy potvrzen fakt, že časem a postupným používáním DEHS v generátoru opravdu dochází k **degradaci** DEHS. Degradovaný DEHS pak přechází z bezbarvé (popřípadě velmi jemně žluté) kapaliny na kapalinu hnědožluté barvy. Projevení degradace změnou barvy a vznikem zápachu při zahřátí bylo popsáno v práci **Stephen M. Bowes III a David L. Swift** [2].



Obrázek 17: 3D sken a profil nedegradovaného DEHS

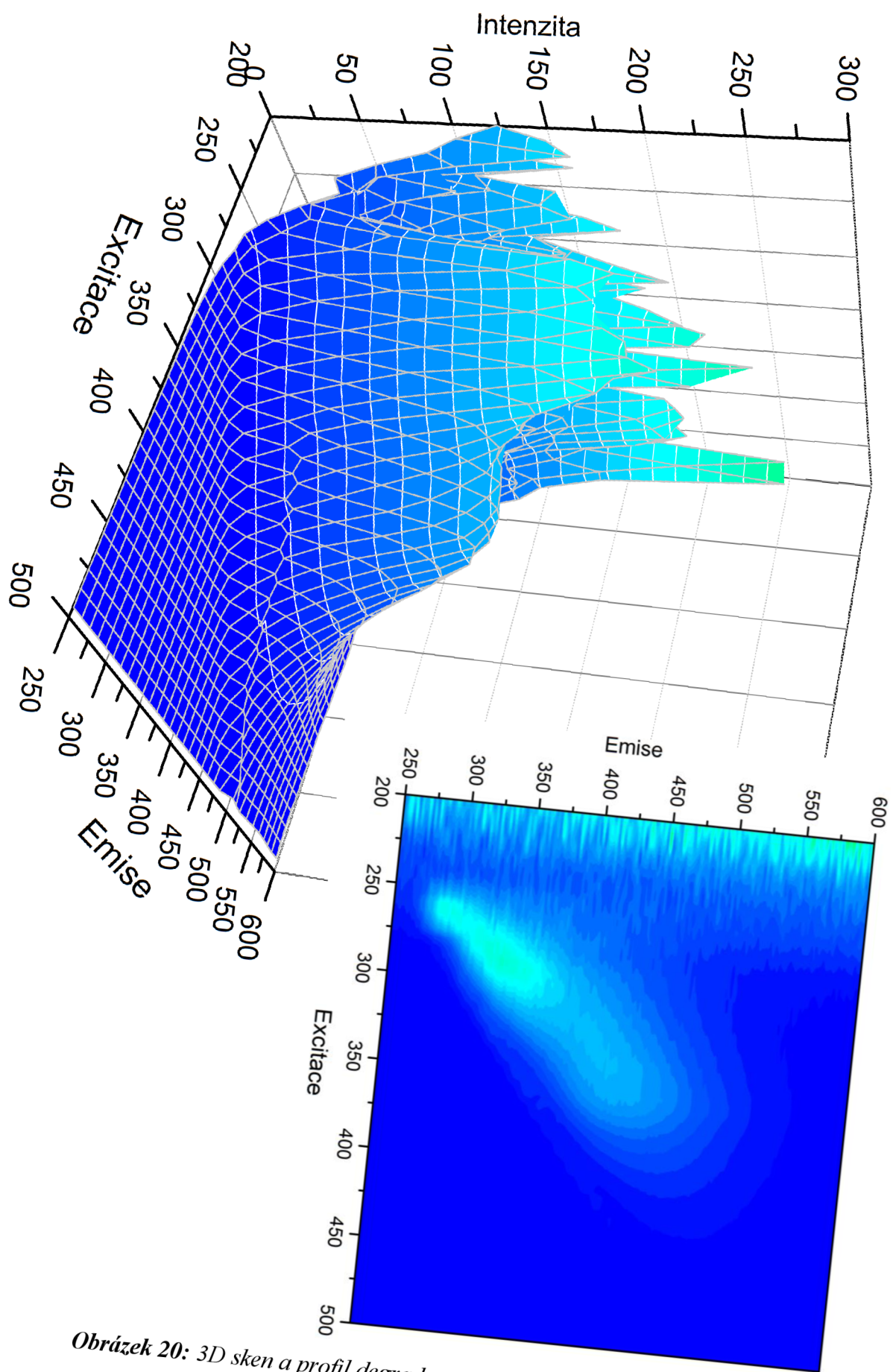


Obrázek 18: 3D sken a profil degradovaného DEHS

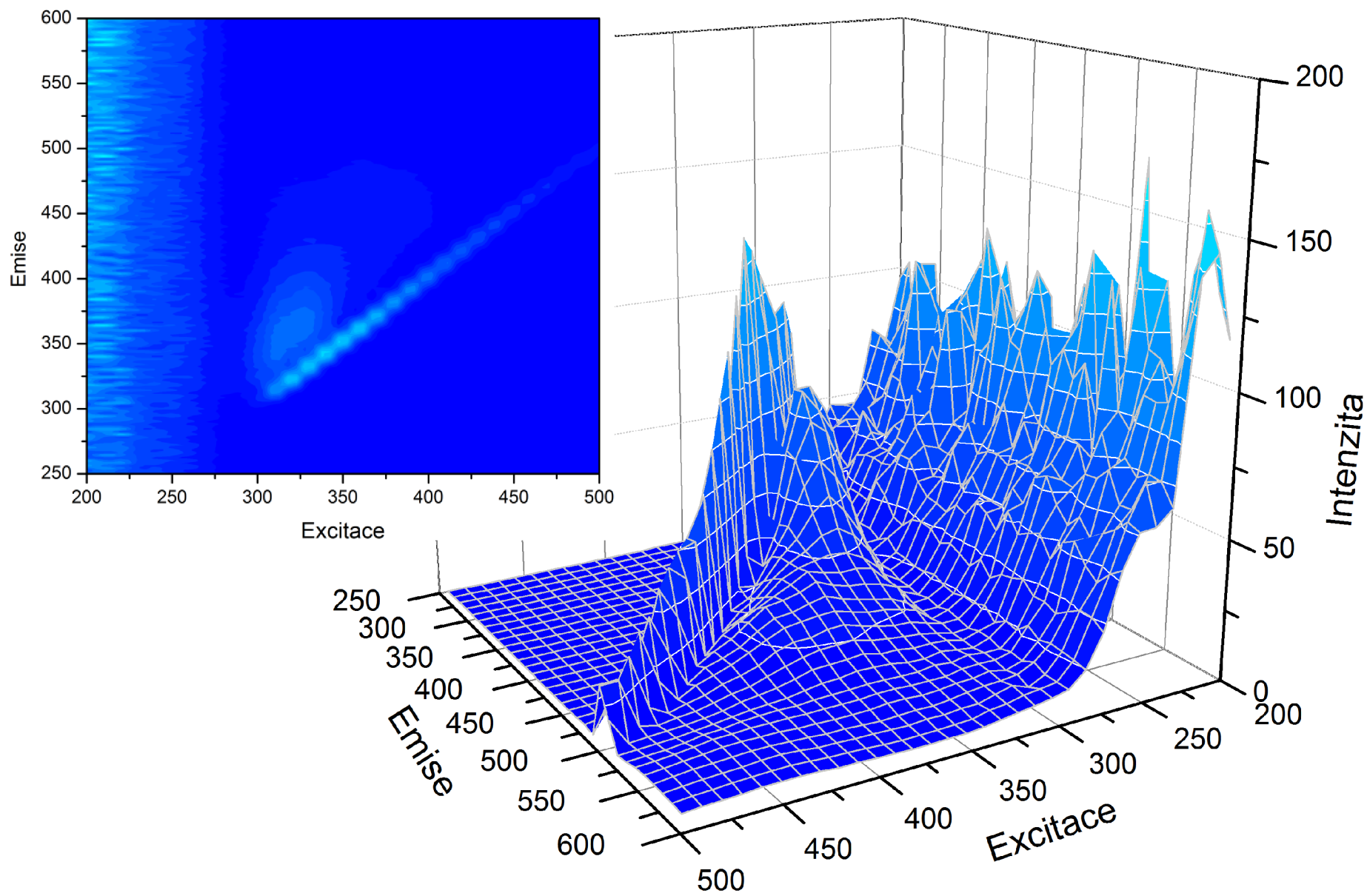


Obrázek 19: 3D sken a profil nedegradovaného DEHS v IPA

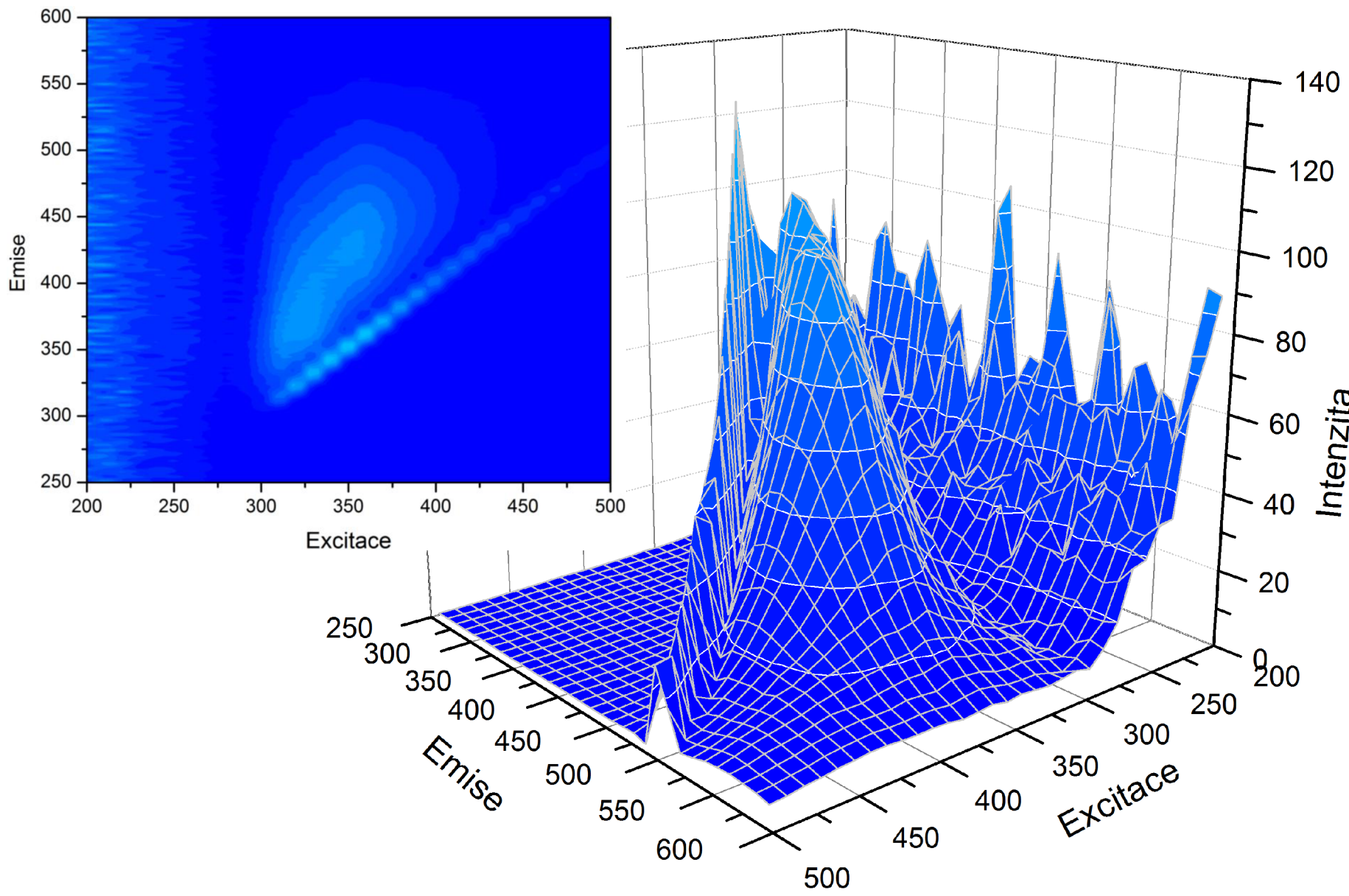




Obrázek 20: 3D sken a profil degradovaného DEHS v IPA



Obrázek 21: 3D sken a profil nedegradovaného DEHS v xylemu



Obrázek 22: 3D sken a profil degradovaného DEHS v xylemu

## 5 ZÁVĚR

Byla provedena literární rešerše dostupných zdrojů k tématice použití DEHS jako aerosolu. Z dostupných zdrojů však bylo zjištěno, že vlastní luminiscenční vlastnosti látky DEHS nebyly zkoumány a tudíž byla tato práce zaměřena na studii chování a spektrální charakteristiky látky DEHS.

Bylo zjištěno, že během dlouhodobého uchovávání látky DEHS dochází k její degradaci, což se projeví změnou barvy původně bezbarvého DEHS na žlutou až žlutohnědou barvu, změna barvy byla popsána **Stephen M. Bowes III a David L. Swift** [2]. K degradaci dochází vlivem teploty během několika týdnů v generátoru aerosolových částic. Z výsledků experimentů nemůžeme jednoznačně určit, zdali fluorescenční spektrum při excitaci 370 nm opravdu patří pouze degradovanému DEHS vzhledem k tomu že jej lze změřit také u čistého DEHS (to však může také být tím, že i čistý již obsahuje malou část degradovaného DEHS).

Z výsledných 3D grafů pro spektrální analýzu vyplývá, že čistý DEHS má maximum intenzity při nízké vlnové délce excitace (295 nm) a nižší vlnové délce emise (320 nm). Oproti tomu DEHS v IPA má maximum při velmi nízké vlnové délce excitace (260 nm) a nízké vlnové délce emise (300 nm), tudíž musí docházet k určité interakci, která posouvá emisní maximum pro čistý DEHS k vyšším vlnovým délkám (interakce DEHS-DEHS). K nízké vlnové délce pro emisi při excitaci kolem 295 nm dochází pro prostředí s hydroxylovou skupinou (methanol, ethanol a IPA). Jako nevhodná rozpouštědla se prokázala tyto rozpouštědla: cyklohexan, chloroform a xylen. Nejvhodnějším prostředím je pak IPA, protože lze dosáhnout vyšší intenzity při stejné koncentraci jako u ostatních prostředí, což má za následek vyšší citlivost (malé změny budou lépe pozorovatelné).

Stabilitní experimenty prokázaly, že dochází k určité interakci mezi IPA a DEHSem jelikož u vzorků v IPA dochází s časem k nárůstu intenzity fluorescence a mícháním se tento proces urychlí. Tím bychom byly schopni připravit kalibrační řadu, ale bylo by potřeba par nepropustných vialek, jelikož po čas míchání dochází k zahřívání a pozvolnému vypařování IPA. U vzorků o koncentraci  $18,28 \text{ g} \cdot \text{l}^{-1}$  a  $182,8 \text{ g} \cdot \text{l}^{-1}$  DEHS v IPA, které byly míchány za laboratorní teploty, jde sledovat postupné rozpouštění DEHS v IPA a vliv míchání na tento proces, což se projevilo rapidním nárůstem intenzity fluorescence, kdy u vzorků došlo během 18 dnů k trojnásobnému nárůstu intenzity. V neposlední řadě je také patrný rozdíl spekter pro rozdílné koncentrace DEHS v IPA, kde při excitaci 295 nm je spektrum vzorku RA strmější a naopak spektrum při excitaci 370 nm pro vzorek RB je více podobné tvaru spektra čistého DEHS. U vzorků o koncentraci  $152,3 \text{ g} \cdot \text{l}^{-1}$  DEHS v IPA je pak také patrný nárůst intenzity fluorescence, ale není tolik markantní, jako když je zároveň použito míchání a navíc je tento nárůst na mnohem delším časovém úseku. Ale i tak je zde zjevný vliv rozpouštění. U vzorků čistého DEHS (sada S) byla pozorována stabilita čistého DEHS a při porovnání skenů můžeme konstatovat, že DEHS při uskladnění v chladu téměř nezměnil intenzitu fluorescence za 2 měsíce. Oproti tomu došlo u DEHS udržovanému při laboratorní teplotě (25-35 °C) k nárůstu fluorescence cca o 30%.

Výsledky IČ spektrometrie nepotvrdily, ani nevyvrátili možnost kontaminace látky DEHS látkami, které by zapříčiňovaly fluorescenci. Nebyla však ani pevně potvrzena teorie interakce DEHS s IPA, která by vysvětlovala zjištěnou fluorescenci. Pro vyvrácení možnosti kontaminace nebo potvrzení interakce mezi DEHSem a IPA budou nutné další postupy.

Z porovnání 3D skenů DEHS nedegradovaného a degradovaného lze vyčíst posun degradovaného DEHS k vyšším vlnovým délkám, což je přisouzeno k jeho degradaci.

Bylo ověřeno, že vlastní luminiscence látky DEHS je dostatečná pro detekci pomocí spektrofluorimetru. Díky vlastní luminiscenci může samotný DEHS nahradit dříve používaný systém DEHS-fluorescein [2,3,4,5,6]. V novém systému by jako jádro sloužil NaCl a DEHS by byl luminiscenční obal.

Závěrem lze konstatovat, že cíle práce byly splněny. Práce tedy poskytuje základní přehled o spektrálním charakteru DEHS, rozdílných spektrálních vlastnostech nedegradovaného a degradovaného DEHS. Dále bylo popsáno chování DEHS v různých rozpouštědlech, kde byl jako nejvhodnější rozpouštědlo zvolen IPA. Jelikož k popisu interakce mezi DEHS a IPA byly provedeny pouze základní experimenty, bude nutné použít i jiných metod pro zkoumání této interakce stejně tak i potvrzení či vyvrácení možné kontaminace.

## 6 SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ

- [1]. BINGHAM, Eula; COHRSEN, Barbara; POWELL, Charles H. *Patty's Toxicology : Volume 7*. 5. [s.l.]: John Wiley & Sons, 2001. 9008 s. Dostupné z WWW: <[http://www.knovel.com/web/portal/browse/display?\\_EXT\\_KNOVEL\\_DISPLAY\\_bookid=706&VerticalID=0](http://www.knovel.com/web/portal/browse/display?_EXT_KNOVEL_DISPLAY_bookid=706&VerticalID=0)>. ISBN 978-0-471-31943-6.
- [2]. BOWES III, Stephen M; SWIFT, David L. Deposition of Inhaled Particles in the Oral Airway During Oronasal Breathing. *Aerosol Science and Technology* [online]. 01.01.1989, 11, 2, [cit. 2011-04-10]. Dostupný z WWW: <<http://www.informaworld.com/smpp/content~db=all?content=10.1080/02786828908959308>>.
- [3]. HORTON, K. D.; MILLER, R. D.; MITCHELL, J. P. Charakterization of a condensation-type monodisperse aerosol generator (MAGE). *Aerosol Science and Technology*. 09.11.1990, 22, 3, s. 347-363.
- [4]. GRGIC, B.; FINLAY, W.H.; HEENAN, A.F. Regional aerosol deposition next term and flow measurements in an idealized mouth and throat. *Journal of Aerosol Science* [online]. 01 2004, 35, 1, [cit. 2011-04-10]. Dostupný z WWW: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6V6B-49N0D9Y-1/2/0b51c8b7e351f7628824d38747a93a78>>. ISSN 0021-85.
- [5]. MIKUŠKA, Pavel; VEČEŘA, Zbyněk. Aerosol Counterflow Two-Jets Unit for Continuous Measurement of the Soluble Fraction of Atmospheric Aerosols. *Analytical Chemistry*. 01.09.2005, 77, 17, s. 5534-5541. Dostupný také z WWW: <<http://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/ac050343l>>. DOI 10.1021/ac050343l.
- [6]. LAHNSTEIN, Kerstin, et al. Pulmonary absorption of aerosolized fluorescent markers in the isolated rabbit lung. *International Journal of Pharmaceutics* [online]. 03.03.2008, 351, 1-2, [cit. 2011-04-10]. Dostupný z WWW: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6T7W-4PSC258-3/2/764e255b601594b55a27de2641364366>>.
- [7]. LÍZAL, F.; ELCNER, J.; JEDELSKÝ, J.; JÍCHA, M. EXPERIMENTAL STUDY OF AEROSOL DEPOSITION IN A REALISTIC LUNG MODEL. *Transaction of the VŠB-Technical university of Ostrava, Mechanical series*, 2011, roč. LVI, č. 3/ 2010, s. 109-114. ISSN: 1210- 0471.
- [8]. *Guidchem Chemical Network* [online]. 1.0. Suzhou Industrial Park : Guidechem, 2010, 08.04.2011 [cit. 2011-04-10]. Dioctyl Sebacate. Dostupné z WWW: <<http://www.guidechem.com/com-guide20459/pro-show946765.html>>.
- [9]. VALEUR, Bernard. *Molecular Fluorescence : Principles and Applications*. Wiley-VCH Verlag GmbH : [s.n.], 2001. 387 s. ISBN 3-527-29919-X.
- [10]. LAKOWICZ, Joseph R. *Principles of fluorescence spectroscopy*. 3rd ed. University of Maryland School of Medicine : Springer Science+Business Media, 2006. 954 s. ISBN 0-387-31278-1.
- [11]. Klán, K. P.: Organická fotochemie. 1. vyd. Brno: Masarykova univerzita, 2001. ISBN 80-2102526-3
- [12]. PILLAI, Omathanu; DHANIKULA, Anand Babu; PANCHAGNULA, Ramesh. Drug delivery: next term an odyssey of 100 years. *Current Opinion in Chemical Biology* [online]. 01.08.2001, 5, 4, [cit. 2011-04-10]. Dostupný z WWW:

- <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6VRX-43J029Y-J/2/31e76254d0e114e6702dfcd96fbd4f32>>. ISSN 1367-5931.
- [13]. PETRAK, Karel. Essential properties of drug-targeting delivery systems. *Drug Discovery Today* [online]. 09.2005, 10, 23-24, [cit. 2011-04-10]. Dostupný z WWW: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6T64-4HVV0C3-R/2/04537247fe21ada5a653f94c178bad35>>. ISSN 1359-6446.
- [14]. STUART, Barbara H.; GEORGE, Bill; MCINTYRE, Peter. *Modern infrared spectroscopy* . 2. New York : John Wiley & Sons, 1996. 200 s. ISBN 978-0471959175.

## 7 SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ

### 7.1 Seznam zkratek

<b>zkratka</b>	<b>význam</b>
DEHS	bis(2-ethylhexyl)dekandioát
IPA	isopropylalkohol
NaCl	chlorid sodný

### 7.2 Seznam symbolů

<b>symbol</b>	<b>význam</b>
A	absorbance
I	intenzita vystupujícího záření
$I_0$	intenzita vstupujícího záření
$I_A$	intenzita absorbovaného světla
$I_F$	intenzita fluorescence
$k_i$	rychlostní konstanta reprezentující deaktivaci procesy
$k_r$	rychlostní konstanta fluorescence
M	základní stav molekuly
$M^*$	excitovaný stav molekuly
Q	zhášec
$S_0$	základní stav molekuly
$S_1$	první excitovaný singletový stav molekuly
$T_1$	první excitovaný tripletový stav molekuly
T	transmitance
$\lambda_{em}$	vlnová délka luminiscenční emise
$\lambda_{ex}$	vlnová délka excitovaného záření
$\tau_0$	doba života fluorescence
$\Phi_F$	kvantový výtěžek fluorescence