

UNIVERZITA KARLOVA
Přírodovědecká fakulta

Studijní program: Klinická a toxikologická analýza



Eva Vodenková

SPEKTRÁLNÍ ANALÝZA TERMOLYTICKÝCH PRODUKTŮ
DROG A KOUŘE CIGARET

Spectral analysis of thermal decomposition of drugs and cigarette
smoke

Bakalářská práce

Vedoucí práce/Školitel: RNDr. Martin Ferus, Ph.D.

Konzultant: doc. RNDr. Zuzana Bosáková, CSc.

Praha 2020

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto závěrečnou práci zpracovala samostatně a že jsem uvedla všechny použité informační zdroje a literaturu. Tato práce, ani její podstatná část, nebyla předložena k získání jiného nebo stejného akademického titulu.

Jsem si vědoma toho, že případné využití výsledků získaných v této práci mimo Univerzitu Karlovu je možné pouze po písemném souhlasu této univerzity.

V Praze dne 13. srpna 2020.

Poděkování

Chtěla bych poděkovat RNDr. Martinovi Ferusovi, Ph.D. za odborné vedení mé bakalářské práce, ochotu a cenné rady. Dále děkuji za trpělivost a vstřícnost při konzultacích. Děkuji za pomoc Mgr. Antonínovi Knížkovi, Bc. Lukášovi Peterovi a Alanu Heaysovi, Ph.D. z Oddělení spektroskopie UFCH JH AVČR za pomoc při měření a vyhodnocení dat. Děkuji Ing. RNDr. Janu Kubátovi, Ph.D. ze společnosti CRYTUR, s.r.o. za poskytnutí nových monokrystalových zdrojů. Děkuji Kriministickému ústavu Policie ČR a plk. Mgr. Vladimíru Táborskému a jeho týmu z Policejního prezidia ČR za poskytnutí drogových vzorků. Děkuji Giuseppe Cassonemu Ph.D. z Istituto per i Processi Chimico Fisici – CNR za teoretickou predikci termolytických produktů rozkladu drog. Tato práce vznikla za podpory projektů MŠMT ERDF/ESF Centrum pokročilých aplikovaných věd, reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000778 a TAČR Pokročilá řešení světelných zdrojů, reg. č. FW01010038.

Abstrakt

Tato bakalářská práce se zaměřuje na spektrální analýzu spalných a termolytických produktů vybraných návykových látek. Byla provedena spektrální analýzy kouře různých tabákových výrobků (cigareta, elektronické cigarety, vodní dýmka) s cílem kvalitativně určit složení kouře a porovnat škodlivost jejich jednotlivých druhů. Hlavním cílem bylo zjistit, jestli jsou elektronické cigarety zdraví méně škodlivé z hlediska složení hlavních produktů detekovatelných vysoce rozlišenou spektroskopii vyskytujících se v kouři v plynné fázi. Dále se práce zabývá podrobnějším rozbohem termolýzy drog v širší teplotní škále a opakovatelnosti měření po delším časovém úseku. K měření absorpčních spekter byly využity také nové spektrální monokrystalové zdroje záření od firmy Crytur a bylo testována jejich použitelnost v oblasti overtonových spekter. Všechna tato měření byla prováděna pomocí infračervené spektroskopie s Fourierovou transformací (FTIR). U tabákových výrobků bylo detekováno méně sloučenin u elektronických cigaret a vodní dýmky oproti klasickým cigaretám. V případě drog se nám podařilo potvrdit opakovatelnost měření a určit procentuální zastoupení jednotlivých látek při různých teplotách. Dále se podařilo prokázat použitelnost měření drog pomocí termolýzy a následnou analýzou pomocí FTIR v praxi. Dále bylo zjištěno, že nové monokrystalové spektrální zdroje jsou pro spektroskopická měření dostatečně stabilní, nicméně z hlediska jejich intenzity a rozsahu bude nutný další technický vývoj.

Klíčová slova

Tabákové výrobky

Elektronické cigarety

FTIR

Drogy

Termolýza drog

Monokrystalové zdroje

Abstract

This bachelor thesis is focused on the spectral analysis of combustion and thermolytic products of selected addictive substances. Spectral analyzes of smoke of various tobacco products (cigarette, electronic cigarettes, hookah) were performed in order to qualitatively determine the composition of smoke and compare the harmfulness of individual types. The main objective was to determine whether the electronic cigarettes are less harmful to health in terms of the composition of the main products detectable by high-resolution spectroscopy occurring in gas-phase smoke. Furthermore, the work deals with a more detailed analysis of drug thermolysis in a wider temperature range and repeatability of measurements over a longer period of time. New spectral single crystal radiation sources from Crytur were also used to measure absorption spectra and their applicability in the field of overtone spectra was tested. All these measurements were performed using Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR). For tobacco products, less compounds were detected in electronic cigarettes and hookahs than in conventional cigarettes. In the case of drugs, we were able to confirm the repeatability of measurements and determine the percentage of individual substances at different temperatures. Furthermore, the applicability of drug measurements by thermolysis and subsequent analysis by FTIR was demonstrated in practice. Next, it was found that the new single crystal spectral sources are sufficiently stable for spectroscopic measurements, however, in terms of their intensity and range, further technical development will be necessary.

Keywords

Tobacco products

Electronic cigarettes

FTIR

Drugs

Drug thermolysis

Single crystal sources

Seznam použitých zkratek

FIR	far infrared radiation, daleká infračervená oblast
FTIR	infračervená spektroskopie s Fourierovou transformací
LC50	střední letální koncentrace
LD50	střední letální dávka
NIR	near infrared radiation, blízká infračervená oblast
MIR	middle infrared radiation, střední infračervená oblast
PAU	polycyklické aromatické uhlovodíky

Obsah

1	Úvod.....	9
2	Teoretická část.....	11
2.1	Kouření a jeho problematika.....	11
2.1.1	Nebezpečné látky cigaretového kouře.....	11
2.1.2	Elektronické cigarety.....	14
2.2	Drogy.....	16
2.2.1	Kokain.....	16
2.2.2	Metamfetamin.....	17
2.2.3	Pyrolýza drog.....	18
2.3	Monokrystaly.....	18
2.4	Spektrometrie.....	19
2.4.1	Rotace a vibrace molekul.....	20
2.4.2	Infračervená spektrometrie s Fourierovou transformací (FTIR).....	21
3	Experimentální část.....	23
3.1	Pracovní postup.....	23
3.1.1	Cigarety.....	23
3.1.2	Drogy.....	23
3.1.3	Nastavení počítače.....	24
3.2	Instrumentace.....	24
3.2.1	Zdroje záření.....	24
3.2.2	Detektory.....	25
3.2.3	Kyveta.....	25
3.2.4	Způsob vyhodnocení.....	26
4	Výsledky a diskuse.....	27
4.1	Cigarety.....	27

4.2	Drogy	29
4.3	Nové zdroje.....	34
5	Závěr.....	36
6	Literatura	37

1 Úvod

Návykové látky byly tématem dob minulých a bohužel jejich problematika se týká také dnešní doby. V případě tabákových výrobků byl vývojový trend počtu kuřáků mezi dospělými občany ČR v letech 2012 až 2018 poměrně stabilní a pohyboval se mezi 28 až 32 % [1]. V současné době lze zaznamenat některé pozitivní trendy, např. zatímco v roce 2017 kouřilo 35 % mladých mezi 15 a 24 lety, v roce 2019 to bylo 23 %. Většina budoucích uživatelů chce nejprve tabákový výrobek či dokonce přímo drogu jen vyzkoušet, ať už ze zvědavosti nebo kvůli nátlaku společnosti, kdy si vytvoří nejprve psychosociální závislost (kouření či drogování v partě). Z těchto lidí se pak často stávají pravidelní uživatelé. V případě cigaret se přidává snaha o snížení stresu a v případě drog chtějí uživatelé zažívat euforické stavy a neřešit problémy. Při dlouhodobém užívání vzniká psychická a mnohem nebezpečnější fyzická závislost, kdy již bez cigarety či drogy postižený zažívá abstinenční příznaky.

Cílem této práce bylo srovnání nových tabákových výrobků s klasickými cigaretami pomocí metody vysoce rozlišené spektrometrie s Fourierovou transformací (HR-FTIR). Tato metoda je sice méně citlivá a spektrum detekovatelných látek je užší, než např. v případě metody GC-MS, nicméně je vhodná pro prvotní screening chemického složení neznámé multikomponentní směsi, a to za předpokladu, že existuje srovnávací databáze měření nezaměnitelných spekter analyzovaných molekul. Výhodou je, že tato spektra jsou pro danou molekulu charakteristická, takže není nutno měřit standardní spektra na daném přístroji tak, jako je tomu v případě GC-MS. V případě požadavku na kvantifikaci je nicméně optimální spektra na přístroji změřit, protože intenzita spektrálních linií je dána také instrumentální funkcí přístroje. Z hlediska kvalitativního a semikvantitativního je však spektroskopie dobře použitelná. Pro každou molekulu je totiž její spektrum jakýmsi otiskem prstu. Nevýhodou je, že když máme ve směsi neznámou látku, jejíž spektrum není změřeno či katalogizováno ve vlastní knihovně, je obtížné jí identifikovat, zejména v případě, jedná-li se o molekulu s širokými pásy, které se kryjí s pásy ostatních látek ve spektru. Dalším cílem bylo prostudovat termolýzu drog v širší teplotní škále a zjistit opakovatelnost, pokud se k termolýze vrátíme po delším čase s jinou aparaturou. Tím pádem zjistit, jestli se tato analýza drog může používat jako metoda v praxi. Posledním cílem bylo ověřit emisní spektra nových zdrojů záření od firmy Crytur a zjistit,

jestli jsme kvalitativně schopni něco změřit a jestli se vyplatí další technologický vývoj těchto zdrojů pro použití ve spektroskopii.

2 Teoretická část

2.1 Kouření a jeho problematika

V současné době je stále více propagován zdravý životní styl, ale počet kuřáků se nijak výrazně nemění. Jedinou výjimkou je demografická skupina 15-24 let, ve které se procento kuřáků snižuje [1]. Běžně se udává, že kouří čtvrtina populace. Podle statistik je vyšší procento kuřáků u méně majetných a méně vzdělaných lidí. Právě pětina úmrtí v České republice je v důsledku kouření. Mezi nejčastější úmrtí způsobené kouřením patří kardiovaskulární nemoci a rakovina plic. V průměru se kuřáci dožívají o 10 let méně a není žádný zásadní rozdíl mezi dožitím mužů a žen.

2.1.1 Nebezpečné látky cigaretového kouře

V cigaretách se nachází mnoho škodlivých sloučenin, přičemž podstatné jsou zejména sloučeniny vyskytující se v cigaretovém kouři (aerosol a plynná fáze). Jednou z důležitých složek je nikotin. Tato látka, patřící mezi pyridinové alkaloidy je vysoce návyková a je jedním z hlavních důvodů závislosti na cigaretách. Je nutné zmínit, že kouř je tvořen plynnou, kapalnou i pevnou fází. Procentuálně: 1 % kapalná fáze, 91 % plynná fáze, 8 % pevná fáze. Ve všech fázích se nachází škodlivé látky, které jsou shrnuté v Tab.:1.

Tab.:1 Přehled vybraných škodlivých látek v cigaretovém kouři

plynná fáze	kapalná fáze	pevná fáze
nitrosoaminy	PAU	benzo[a]pyren
formaldehyd	aromatické aminy	5-methylchrysten
kyanovodík	anorganické sloučeniny	
acetaldehyd	nikotin	

Průměrná koncentrace nikotinu v krvi u kuřáků je 33 ng/ml. Je zajímavé, že koncentrace nikotinu v krvi je stejná u mužů i u žen, ačkoliv spotřeba cigaret u mužů je vyšší. Koncentraci nikotinu v krvi neovlivňuje ani typ kouřené cigarety [2]. V poslední době se hodně řeší toxicita nikotinu. V databázích se uvádí, že smrtelná dávka pro dospělého člověka je 30-60 mg, což odpovídá perorální LD50 0,8 mg/kg. Pokud by to

odpovídalo skutečnosti, znamenalo by to, že nikotin je toxicitější než kyanid. Bylo zjištěno, že po požití tabáku nebo nikotinových žvýkaček až do hodnoty 6 mg/kg nastává intoxikace bez způsobení smrti. Přes tyto rozcházející se skutečnosti byl zjištěn hrubý odhad z posmrtných analýz. Kouření cigaret vede k absorpci přibližně 2 mg nikotinu a vede ke koncentracím v arteriální plazmě asi 0,03 mg/l. Na základě 20% perorální biologické dostupnosti nikotinu a za předpokladu lineární kinetiky by perorální dávka 60 mg vedla ke zvýšené plazmatické koncentraci asi 0,18 mg/l. Zprávy o fatálních intoxikacích nikotinem naznačují, že spodní hranice letálních koncentrací nikotinu v krvi je 2 mg/l, což odpovídá 4 mg/l plazmy, to je koncentrace dvacetkrát vyšší než koncentrace způsobená příjmem 60 mg nikotinu. Na základě tohoto odhadu spodní hranice působící fatální následky je požití 0,5-1 g nikotinu, což odpovídá perorálnímu LD50 6,5-13 mg/kg. [3] Pro zajímavost poznamenejme, že v kriminalistice je znám případ „dokonalé“ vraždy nikotinem z roku 1850. Nikotin bylo do té doby velmi obtížné prokázat, nicméně příznaky otravy stejně jako nález chemické aparatury a velkého množství tabákových listů v domě podezřelého vraha, hraběte de Bocarme, svědčily o tom, že jeho bratr Gustave Fougnes nezemřel náhodou. Chemik Jean Servais Stas vyvinul následně metodu detekce nikotinu v těle oběti a vrah byl usvědčen.

V případě příjmu nikotinu kouřením se tato látka během pár sekund po inhalaci kouře dostane krví do mozku, kde působí jako stimulant nikotinových receptorů, což je podtyp acetylcholinových receptorů, které jsou lokalizovány hlavně v kortexu, hipokampu, thalamu, hypothalamu a v nervosvalových ploténkách kosterních svalů. Jedná se o ligandem ovládaný kanál ve formě pentameru. Navázáním dvou molekul nikotinu se otevře kanál, kterým proudí kationty a ty pak způsobí depolarizaci kanálu. Stimulací receptorů nikotinem dochází k uvolnění acetylcholinu, dopaminu, serotoninu a dalších. [4] S požitím nikotinu je spojeno mnoho účinků, například zvýšená produkce slin, zvýšení krevního tlaku, zrychlení činnosti srdce a další. Kromě návykovosti lze o škodlivosti účinků nikotinu diskutovat, stejně jako o škodlivosti dalších stimulantů, např. kávy, listů koky apod. V tabáku a cigaretovém kouři jsou ovšem přítomny další chemické látky s prokazatelně škodlivými účinky. Kromě karcinogenních nitrosaminů v tabákových listech, které způsobují rakovinu jícnu a jazyka při žvýkání tabáku, jsou v cigaretovém kouři zastoupeny plyny a aerosoly, které mají výrazně negativní účinky na lidský organismus.

Významnou skupinu tvoří také toxické plyny. Kvantitativně nejvýznamnější je oxid uhelnatý. Výtěžek z běžné cigarety se pohybuje v rozmezí 5-20 mg. U cigaret s vysokým výtěžkem nikotinu filtry moc nesnižují výtěžek oxidu uhelnatého, naopak u cigaret s nízkým obsahem nikotinu se prokázala vysoká účinnost filtrů a výtěžek oxidu uhelnatého byl znatelně nižší. [5] Oxid uhelnatý je prudce jedovatý LC50 (inhalace, potkan, 4 h) je 1807 ppm a pro člověka je LC50 (inhalace, 1 h) 4000 ppm. Normální koncentrace oxidu uhelnatého v domácnostech se pohybuje mezi 0,5-5 ppm. Nejznečištěnějšími oblastmi oxidem uhelnatým jsou centra velkých měst, kde se vyskytuje koncentrace 100-200 ppm a jsou to například Los Angeles, New York a město Mexiko. Pokud je člověk pasivním kuřákem, je navíc vystaven cca 1,7 ppm CO.

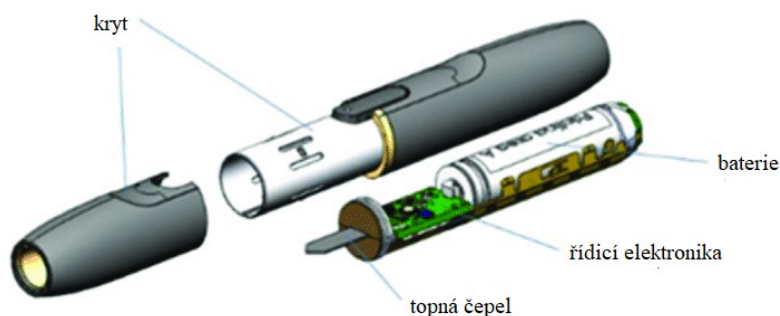
Oxid uhelnatý ovlivňuje všechny orgány a tkáně, proto se mnoho studií zaměřuje na zkoumání jeho účinků na organismus. U pacientů s diagnózou otravy oxidem uhličitým se prokázal zvýšený výskyt arytmie, ischemické srdeční choroby a městnavého srdečního selhání. [6] Kouření cigaret zvyšuje hladinu karboxyhemoglobinu. Jelikož afinita hemoglobinu k oxidu uhelnatému je mnohem větší než ke kyslíku, oxid uhelnatý tak vytlačuje kyslík z hemoglobinu. Následně se snižuje množství kyslíku dostupného pro myokard. Oxid uhelnatý se také kombinuje s myoglobinem a může zhoršovat difuzi kyslíku do mitochondrií. [7]

Do skupiny toxických plynů také patří oxidy dusíku, formaldehyd a kyanovodík, nejvýznamnější je poté oxid dusičitý, který je pro člověka nebezpečný už ve velmi nízkých koncentracích.

U kuřáků se často projevuje chronická otrava způsobená cigaretovým kouřem, tedy kombinací až synergií působení jednotlivých jeho složek. Projevuje se větší kazivostí zubů, zánětem spojivek nebo zvýšeným rizikem respiračních onemocnění. Stopově se v cigaretovém kouři vyskytují těžké kovy, zejména nikl a kadmium. Viditelnost cigaretového kouře má na svědomí dehet, který je tvořen malými pevnými částicemi. Tyto částice jsou zanášeny do plicních sklípků, kde se následně usazují. Silný kuřák může za rok vdechnout až 0,5 kg dehtu. Většinu tohoto množství kuřák vykašle, ale část se v plicních sklípcích usadí. Dehet je silně karcinogenní látka, a proto je rakovina plic jedním z nejčastějších důvodů úmrtí kuřáků.

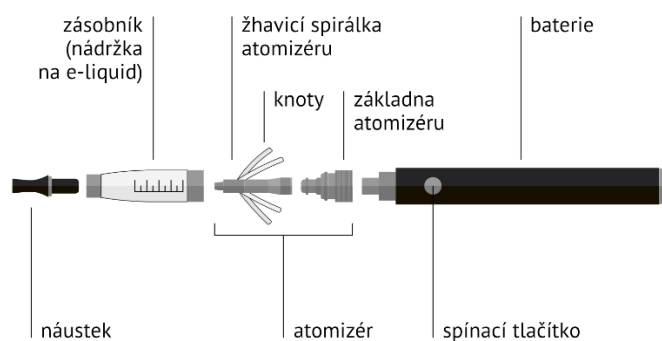
2.1.2 Elektronické cigarety

V poslední době se začínají rozmáhat elektronické cigarety například IQOS a vaporizéry. IQOS je obchodní název elektronického zařízení od společnosti Philips Morris, které ohřívá tabákové náplně značky HEETS při teplotě 350 °C, zatímco u normální cigarety je teplota ohřevu 600-850 °C. Tabák se nahřívá pomocí zlatem potažené keramické čepele. Během zahřívání se z tabáku uvolňuje nikotin spolu s glycerinem. Schéma IQOS viz. Obr.: 1.



Obr.:1 Schéma elektronické cigarety Iqos. Převzato z [8]

Vaporizér je zařízení, které funguje na základě odpařování aktivních látek nacházející se v bylinkách, bez toho, aby došlo ke vzplanutí materiálu. Schéma vaporizéru je na Obr.:2.



Obr.:2 Schéma elektronické cigarety vaporizér. Převzato z [9]

U vaporizérů se využívají dva typy zahřívání látek. Prvním z nich je kondukce neboli zahřívání byliny přímým kontaktem se zdrojem tepla. Cívka se zahřívá pomocí baterie a následně se tak zahřeje i keramická nebo kovová komora s bylinami. Byliny,

které jsou v kontaktu se stěnou komory, se promění na páru. Tyto vaporizéry jsou preferovány novými uživateli, především díky jejich nízké ceně. Druhý typ je konvence neboli zahřívání materiálu horkým vzduchem foukaným přes topný prvek. Pára, která vzniká ve vaporizéru zahřívá olej či byliny rovnoměrně. Tento typ je více komplexní, byliny nebo olej jsou zde oddělené od zdroje tepla. Výhody a nevýhody těchto typů jsou zahrnuty v Tab.:2.

Tab.:2 Výhody a nevýhody dvou typů vaporizérů

Vaporizér			
Kondukční		Konvenční	
výhody	nevýhody	výhody	nevýhody
nízká cena	nerovnoměrné zahřívání	rovnoměrné zahřívání	vysoká cena
rychlé zahřívání	malá komplexnost	komplexní	pomalé zahřívání
malá údržba	vznik hoření bylin	nevzniká hoření bylin	pravidelná údržba
volba teploty	méně efektivita	velmi efektivní	horší nastavení teploty

Vaporizace bylinek se začala využívat už v 5. stol. př. n. l., kdy se takto vzniklá pára používala k zásobování parních lázní. Vaporizace ve smyslu vdechování vznikla až mnohem později, a to v 5. stol. n.l. na území dnešního Afghánistánu, kde byla vymyšlena vodní dýmka. Elektronické vaporizéry mají počátek ve 20. letech 20. století, kdy byl vymyšlen a patentován první vaporizér. Pokus o jeho vylepšení nastal v 60. letech, kdy Herbert A. Gilbert vynalezl první netabákovou cigaretu bez kouře, kdy ohřátý vzduch procházel přes látku, od které získal příchut'. Dnešní elektronická cigareta, tak jak jí známe, byla vynalezena v roce 2004 v Číně.

Užívání elektronických cigaret může být špatné, pokud se užívají často. Silní kuřáci, kteří přejdou z cigaret na vaporizéry mohou postihovat záněty v krku. Spousta také říká, že při kouření je škrábe v krku, což se u normálních cigaret nestane.

Mnoho studií se věnuje škodlivosti elektronických cigaret. Jedna z nich se zabývala rozdílem mezi klasickým cigaretovým kouřem a výparem z elektronických cigaret. Výsledkem bylo, že klasický cigaretový kouř zvyšuje genotoxicitu, cytotoxicitu a mutageny. Při zkoumání výparů z elektronických cigaret byla zvýšená cytotoxicita, ale oproti klasickým cigaretám byly hodnoty nižší. Mutagenní a genotoxická odpověď nebyla pozorována. [10]

2.2 Drogy

2.2.1 Kokain

Celosvětová historie kokainu začíná na počátku 18. století, kdy začal být zájem o listy koky, ze kterých se kokain vyrábí. Většího rozmachu se kokain dočkává v moderním lékařství na počátku 19. století, kde byl používán jako lokální anestetikum. V 19. století byl také vymyšlen nápoj, který obsahoval výtažky z koky a víno. O tomto nápoji se tvrdilo, že léčí melancholii a navrácí energii a vitalitu. V roce 1886 v Atlantě, USA nastala prohibice, a tak se z původního receptu odstranilo víno, které bylo nahrazeno sirupem. Tento nápoj byl pojmenován Coca Cola – nápoj abstinentů. V roce 1904 se rozšířilo vědomí o narkotických účincích kokainu a vláda zakázala výtažky z koky používat. Udává se, že v původní Coca-coly bylo 118 ml extraktu z koky/9,5 l vody. V dnešní době se do Coca-coly přidává výtažek z koky zbavený kokainu, a to kvůli lepší chuti. Ve 20. století začal být kokain postupně zakazován a řazen mezi silně návykové látky i v dalších světových zemích. Produkce kokainu se tak přesouvá z Peru a Bolívie (ve kterých je pěstování zakázané) do Kolumbie. [11]

Koka je pěstována malými farmáři v odlehlých místech džungle, a to především v Kolumbii. Částečně se pěstuje i v Peru, Bolívii nebo Chile. Pro místní obyvatele se často jedná o jediný způsob obživy. Výroba kokainu začíná namočením kokových listů do velkých kovových nádob s benzinem. Benzin, obsahující kokainový alkaloid, se přelije do plastového barelu se zředěnou kyselinou. Benzin se následně odstraní a do roztoku se přidá hydrogen uhličitán sodný nebo amoniak, čímž vzniká kokainová báze, která se následně přefiltruje přes kus látky. V dalším kroku se kokainová báze usuší a vznikne tak koncentrovanější směs. Vody zbavený materiál se rozpustí v acetonu nebo etheru a zahřeje se na vodní lázni. K vroucí kapalině se přidá butanon spolu s koncentrovanou kyselinou chlorovodíkovou, tím dochází ke krystalizaci kokainového hydrochloridu. Přebytečná rozpouštědla se odstraní, nejprve ručně, poté pomocí hydraulického lisu a nakonec pomocí mikrovlnek. Tím se vytvoří základ pro práškový kokain. Po dokončení výrobního procesu následuje distribuce dealerům, kteří kokain míchají s dalšími látkami za účelem většího zisku. Typicky se jedná o směsi s moukou, pracím práškem, lidokainem a další.

Po požití kokainu se během minuty zvýší tepová frekvence a krevní tlak, který se ale zvyšuje pomaleji. Největší tzv. „rauš“ nastává 3 minuty po inhalaci, naopak nejhorší

zážitky popisované jako paranoia nastávají 11 minut po inhalaci. [12] Při dlouhodobém používání se tvoří vyšší tolerance na drogu, takže je potřeba zvýšit dávku, frekvenci dávkování nebo obojí. [13] Také může dojít k častějším depresím i při požití malého množství kokainu. Pravidelné šňupání kokainu může vést ke ztrátě čichu, krvácení z nosu a problémům s polykáním, což vede k chronickému zanícení nosu. Lidem, kteří si kokain podávají nitrožilně hrozí alergické reakce přímo na kokain nebo na přísady, které jsou v pouličních kokainových směsích často přítomny. V extrémních případech může nastat i smrt. Mnoho chronických uživatelů kokainu ztrácí chuť k jídlu a dochází u nich často k podvýživě. Kokain má toxické účinky na srdce a kardiovaskulární systém. Užívání kokainu je také spojeno s vyšším rizikem mrtvice a zánětu srdečního svalu. [14] Při dlouhodobém užívání může nastat mnoho neurologických problémů, jako například krvácení do mozku a poruchy pohybu. [15]

2.2.2 Metamfetamin

Historie metamfetaminu začíná na počátku 19. století v Japonsku. Právě zde byl také poprvé syntetizován z efedrinu v čisté krystalické formě, a to v roce 1919. V roce 1920 byl postup výroby patentován a metamfetamin se následně začal předepisovat jako antidepressivum. Již koncem třicátých let byla pozorována silná závislost při jeho dlouhodobém užívání. Během druhé světové války byl podáván vojákům pro zlepšení výkonu a koncentrace. Metamfetamin byl rovněž používán v léčbě závislých na kokainu. V polovině dvacátého století se začíná rozvíjet ilegální produkce metamfetaminu, která ovšem během 70. a 80. let upadá a později téměř vymizí. Jedinou výjimkou je Československo, kde byl objeven jednoduchý postup výroby a látka zde dostala i svůj nový název - pervitin. Za hranice Československa se pervitin v této době příliš nešířil, jelikož byl produkován pouze v malých laboratořích, v jejichž blízkém okolí byl většinou i rychle spotřebován. [16]

Metamfetamin se vyrábí redukcí efedrinu nebo pseudoefedrinu za použití dalších chemikálií. Většinou se jedná o běžně dostupné, domácí prostředky. Výrobci metamfetaminu získávají pseudoefedrin z volně prodejných léků proti nachlazení, a proto je pro státní orgány těžké kontrolovat jeho výrobu. S výrobou metamfetaminu je také spojeno poškození životního prostředí. K jeho výrobě se používají hořlavé a žíravé

sloučeniny, které jsou velice toxické a výrobci se zřídka kdy zabývají jejich správnou likvidací.

Nejčastěji se využívají tři metody: lithium/čpavková metoda – hrozí nebezpečí vzniku plynu vodíku a toxických výparů, metoda jod/kyselina fosforená a metoda kyselina jodovodíková/červený fosfor. [17]

Mezi krátkodobé účinky pervitinu patří zvýšená pozornost a snížená únava, snížená chuť k jídlu, euforie, zrychlené dýchání, nepravidelný srdeční rytmus. Dlouhodobými účinky jsou paranoia, halucinace, opakující se motorická aktivita, změny struktury a funkce mozku, ztráta paměti, agresivní chování, poruchy nálady, vážné zubní problémy a ztráta váhy.[18]

2.2.3 Pyrolýza drog

Kouření je nejčastější způsob konzumace drog. Právě proto se v kontextu s drogami běžně používá pojem pyrolýza. Jedná se o termický proces, při kterém je látka vystavená teplotě, která přesahuje mez její stability. Pyrolýza tedy značí proces rozkladu látky na plynné produkty za aerobních nebo anaerobních podmínek. Pyrolýza není založena na spalování látky, ale na jejím zahřívání. Ve většině případů je počáteční štěpení založeno na síle vazeb. Nově vznikající sloučeniny lze předpovídat na základě relativní stability produktů a potenciálního přeskupování produktů (některé vznikající látky nemusejí být stabilní, tak přejdou na jinou formu). Pyrolytické reakce zahrnují eliminace, oxidace, redukce, substituce a adice. [19]

2.3 Monokrystaly

S rozvojem techniky je snaha využívat látky, které by měly mít dokonalé vlastnosti. Z tohoto důvodu je snaha vyvíjet monokrystalické látky se strukturální dokonalostí, které se v přírodě vyskytují ojediněle nebo vůbec. Růst monokrystalů ve vodných roztocích je znám už ze starověku, největší rozvoj však přišel až ve 20. století s rozvojem techniky. V roce 1916 ponořil omylem Jan Czochralski, polský chemik, pero do kelímku s roztaveným kovem, po jehož vyjmutí vznikl na konci pera monokrystalický kus taveniny. Z tohoto omylu se stala hlavní metoda přípravy monokrystalů: materiál se vloží do válcového kelímku a roztaví se odporovými nebo vysokofrekvenčními ohříváči. Po úplném roztavení se očkovací krystal o průměru několika mm ponoří do taveniny a malá

část krystalu se roztaví. Na rozhraní se vytvoří meniskus. Poté se krystal pomalu vytáhne z taveniny a ta pak rozhraní krystalizuje. [20] Dnes se vyrábí monokrystaly využívané pro optiku a optoelektroniku. Dále pak na pěstování nových látek určených převážně pro nelineární optické aplikace. [21] V současné době je špičkovým světovým výrobcem monokrystalů česká firma CRYTUR, spol. s r.o. Firma navazuje na již sedmdesátiletou turnovskou tradici vědeckého a technického výzkumu a vývoje v oblasti přírodních a umělých krystalů. CRYTUR vznikl z původního československého podniku Monokrystaly Turnov, s.p., který byl v roce 1998 odprodán společností Preciosa, a. s.

Vědecký a technický vývoj, jehož základem je také těsná spolupráce s akademickou sférou, se nyní orientuje také na vysoce výkonné zdroje aplikovatelné pro osvětlování a nově také pro spektroskopii. V současné době jsou k dispozici pilotní technické koncepty monokrystalových zdrojů blízkého infračerveného záření, které jsou buzeny modrými diodami. Aplikovatelnost těchto zdrojů z hlediska jejich rozsahu, stability a intenzity byla ověřena v rámci této práce.

2.4 Spektrometrie

Spektrometrie resp. spektroskopie je obor chemické fyziky zabývající se měřením a vyhodnocováním elektromagnetického záření emitovaného hmotou nebo interagujícího s hmotou.[22]

Závisí tedy na elektromagnetickém záření a vlastnostech analyzované hmoty. Elektromagnetické záření má duální charakter, víme tedy, že se chová jako vlna a zároveň se chová jako proud elementárních částic, neboli fotonů. Pohybující se částici definujeme takzvaným de Broglieovým vztahem (rovnice 2.1),

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} \quad (2.1)$$

kde h je Planckova konstanta ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js), m je hmotnost částice, v je rychlost částice. Vlnění definujeme základními veličinami. Jsou to: Frekvence či kmitočet ν udávající počet kmitů za sekundu ($\text{Hz} = 1$ kmit za sekundu). Vlnová délka λ udávající dráhu, kterou vlna urazí za dobu jednoho kmitu. Vlnočet udávající počet vln připadajících na dráhu 1 cm (cm^{-1}). Rychlost záření v udávající vzdálenost, kterou vlna urazí za sekundu.

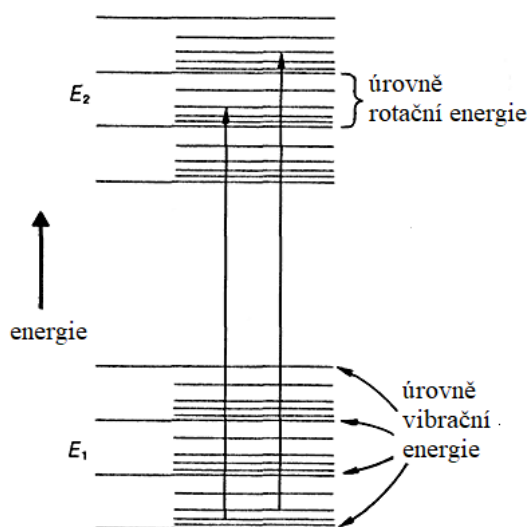
Pro energii fotonů byl Planckem odvozen vztah viz rovnice 2.2.

$$E = h \cdot \nu \quad (2.2)$$

Tento vztah vystihuje souvislost mezi vlnovými vlastnostmi záření a energií. Záření je tedy formou energie.[22]

2.4.1 Rotace a vibrace molekul

Vnitřní vibrační energie molekul je dána pohybem jednotlivých atomů, které vibrují kolem svých rovnovážných poloh. Počet možných vibračních pohybů (módů) je dán u lineárních molekul $3N-5$ a u nelineárních molekul $3N-6$. Kromě vibračního pohybu molekuly vykonávají také pohyb rotační. Vibrační a rotační energie jsou kvantovány a stavy jsou rozděleny do jednotlivých rotačně-vibračních energetických hladin. Každá z těchto hladin přísluší do elektronového stavu dané molekuly. Elektronový stav je dán konfigurací elektronů v molekulárních orbitalech. Při interakci kvanta záření vhodné energie dojde podle výběrových pravidel k přechodu mezi rotačními hladinami (nízké energie zpravidla v oboru radiových vln), rotačně-vibračními (střední energie zpravidla v oboru tepelného sálání) či elektronově-rotačně-vibrační (poměrně velké energie v oboru viditelného světla či blízkého UV). Při absorpci mezní hodnoty energie dojde k disociaci molekuly. Schematicky znázorňuje rozdělení energetických hladin molekuly Obr.:3.



Obr.:3 Schématické znázornění energetických hladin molekuly převzato z [23]

Přechod mezi základním a prvním excitovaným stavem molekuly, který je pro každou molekulu charakteristický a zpravidla vykazuje velkou intenzitu ve spektru dané

molekuly, se nachází fundamentálním neboli základním přechodem. Poznamenejme, že většina molekul je za normální teploty excitována právě z tohoto základního stavu.

U více atomových molekul lze soustavu popsat pomocí mechanického modelu jako soustavu hmotných bodů vázaných silami chemických vazeb. Vibrace víceatomových molekul lze popsat jako součet harmonických pohybů, tzv. normálních vibrací. Při normální vibraci všechny atomy v molekule vibrují se stejnou frekvencí ve stejné fázi, ale s různými amplitudami. Každá normální vibrace molekuly je charakterizována určitou frekvencí. Počet normálních vibrací pro danou molekulu je dán počtem vibračních stupňů volnosti. Například nelineární N-atomová molekula vykazuje $3N - 6$ vibračních stupňů volnosti neboli $3N - 6$ normálních vibrací. Výjimkou jsou lineární molekuly, které mají jen dva rotační stupně volnosti, takže vibrační pohyb nabývá $3N - 5$ stupňů volnosti. Jsou 3 typy základních vibrací: symetrická, antisymetrická a deformační. Každé vibraci odpovídá ve spektru jeden absorpční pás. Symetrie molekuly často rozhoduje, zda vibraci v infračerveném spektru pozorujeme, protože u symetrických molekul se může dipólový moment vyrušit a my nic nepozorujeme. Následně počtu pásů, které ve spektru pozorujeme můžeme odhadnout strukturu molekuly.

Samotná rotace se vyskytuje pouze v plynných látek. Diatomické molekuly, rotují jako celek, ale nekonají vibrační pohyby. U polyatomových molekul je rotace rozložena na otáčení kolem tří hlavních os procházející těžištěm.

Při absorpci záření molekulou v MIR a NIR dochází k současné změně vibračního i rotačního stavu. V absorpčním spektru se neobjevuje jen jeden pás s maximem při frekvenci ν , ale po obou stranách této frekvence se objeví série absorpčních linií, odpovídajících vibračně rotačním přechodům. Pokud má přístroj malé rozlišení, pak získáme jen obrys křivky s dvěma větvemi. U víceatomových molekul závisí vibračně rotační přechody i na dipólovém momentu. [22]

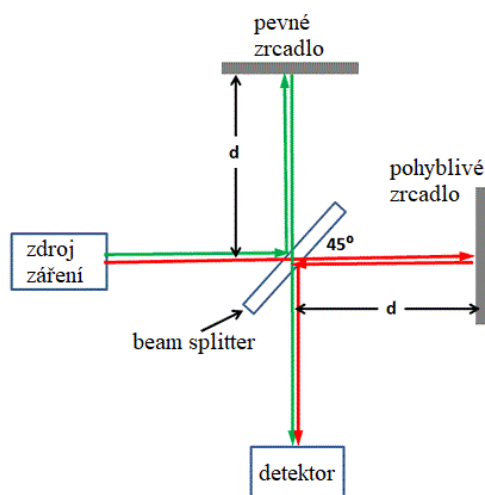
2.4.2 Infračervená spektrometrie s Fourierovou transformací (FTIR)

Metoda infračervené spektrometrie je založena na faktu, že molekulární vibrace absorbují tepelné sálání v rozsahu infračervených délek elektromagnetického záření. Rozsah vlnočtů infračerveného záření je $20-14300 \text{ cm}^{-1}$ a je rozděleno do tří oblastí MIR, NIR a FIR. Pro spektroskopii se nejčastěji využívána oblast středního infračerveného záření

(MIR), tedy oblast $400\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$. V této oblasti dochází k charakteristickým fundamentálním rotačně vibračním přechodům.

FTIR spektrometr je jednopaprskový přístroj, vzhledem k rychlosti skenování se předpokládá, že je systém mezi skenováním vzorku a pozadí dostatečně stabilní. Měření srovnávacího vzorku probíhá odděleně. [24]

Základem FTIR je Michelsonův interferometr na Obr.:4. Ze zdroje přichází záření, které dopadá na polopropustný dělič paprsků (beam splitter), kterým polovina záření projde na pevné zrcadlo a polovina se odrazí na pohyblivé zrcadlo. Tyto dva paprsky se odrazí od zrcadel a dopadnou opět na dělič paprsků, kde se vždy spojí polovina těchto záření a prochází vzorkem. Tímto způsobem dochází k interferenci. Změna optického dráhového rozdílu paprsků vytváří signál, který dopadá na detektor a generuje interferogram.



Obr.:4 Michelsonův interferometr převzato z [25]

Jako zdroj záření se ve FIR používá vysokotlaká rtuťová výbojka, v MIR a NIR nejčastěji SiC neboli Globar a ve viditelné oblasti se využívá wolframová nebo halogenová výbojka. Pro FTIR spektrometrii je nutné použít detektory s velmi rychlou odezvou, proto se používají detektory schopné sledovat změny signálu nad 10 kHz. Jedna z hlavních výhod FTIR je velká rozlišovací schopnost, která závisí na velikosti optického dráhového rozdílu a může být ještě zvětšena posunem zrcadla. Díky dnešní výkonosti přístrojů lze několikanásobné měření spekter spojit v jedno, aby se zlepšil poměr signálu k šumu. [22]

3 Experimentální část

Tato práce má dvě části, první je měření různých tabákových výrobků a porovnávání jejich škodlivosti. Ve druhé části jsme se zabývaly termolýzou drog.

K měření bylo použito několik vzorků cigaret od značek: Camel (8 mg dehet, 0,6 mg nikotin, 9 mg CO), L&M (8 mg dehet, 0,9 mg nikotin, 9 mg CO), Davidoff (7 mg dehet, 0,6 mg nikotin, 7 mg CO), Lucky Strike (10 mg dehet, 0,8 mg nikotin, 10 mg CO). Z elektronických cigaret byly použity vaporizér a iqos (ve které byla cigareta označena červenou barvou). Jako další tabákový produkt byla zkoumána vodní dýmka. Vzorky drog byly získány ze zdrojů Policie ČR, které měly označení kokain 1281 a pervitin 1213. Jednalo se o vzorky zabavené v terénu, tyto vzorky tedy neměly jakýmkoliv způsobem definovanou či certifikovanou svou čistotu.

3.1 Pracovní postup

3.1.1 Cigarety

Připravili jsme evakuovanou baňku vybavenou vakuovým ventilem. Kouř ze zapálené cigarety byl následně odsát vakuovou hadicí značky Tygon do této baňky tak, že byl uvolněn ventil, díky vzniklému podtlaku byl dávkován cigaretový kouř. Nakonec byl kouř stejným způsobem dávkován do evakuované měřicí kyvety umístěné ve vzorkovém prostoru FTIR spektrometru. Měření byla prováděna v širokospektrém rozsahu od $600\text{-}15000\text{ cm}^{-1}$. Podle měřeného rozsahu byly použity různé detektory MCT – rozsah: $600\text{-}4000\text{ cm}^{-1}$, InSb – rozsah: $4000\text{-}9000\text{ cm}^{-1}$, SiDiode – rozsah: $9000\text{-}15000\text{ cm}^{-1}$.

3.1.2 Drogy

Vzorek kokainu byl nejprve odvážen v přesném množství 0,1 g a následně byl vložen do zkumavky, která byla umístěna kolmo do stojanu, na kterou byla připojena gumová hadička pomocí spojovacího ventilu. Hadička byla dále připojena přes skleněnou linku ke kyvetě. Následně byla celá aparatura evakuována a poté pomocí ventilu řádně uzavřena. V dalším kroku byla zkumavka opatrně zasunuta do termolyzační pece, kde probíhala termolýza za teplot 350, 450, 550, 650 a 750 °C. Termolýza byla prováděna 10 minut. Po skončení termolýzy byla zkumavka vyjmuta z pece a bylo vyčkáno, dokud se zkumavka neochladila na pokojovou teplotu. Následně byl otevřen ventil a plyny

vzniklé během termolýzy byly převedeny do kyvety a bylo zahájeno měření spekter. Měření bylo prováděno na přístroji Bruker IFS-125 s rozlišením $0,05 \text{ cm}^{-1}$ v rozsahu $600\text{-}4000 \text{ cm}^{-1}$ za použití MCT detektoru. Bylo měřeno ve 20 cm dlouhé kyvetě. Během celého měření byl měřen tlak v aparatuře, aby se zjistily případné netěsnosti aparatury. Po dokončení měření byla linka evakuována a následně bylo prováděno další měření. Analogicky bylo provedeno měření pro metamfetamin.

3.1.3 Nastavení počítače

Nejprve byl přes explorer otevřen Direct kontrol panel, který sloužil k ovládání přístroje. Zde byla zkontrolována nastavení. Vacuum control – aby bylo zabráněno vstupu CO_2 a vodní páry, proto musely být Flaps neboli vakuové závěrky zavřené, následně byl pomocí příkazu command 1 vyčerpán vzduch. V Source control byl vybrán vhodný zdroj světla, podle oblasti měření. Po vybrání vhodného zdroje bylo vyčkáno 4 minuty, aby bylo vše řádně nastaveno. Ve Scanner control bylo zapnuto pohyblivé zrcadlo. V dalším kroku byl otevřen program Opus, ve kterém se měřilo. Přes Advanced measurment byla nahrána metoda, následně byl změněn název souboru. Dále byl zadán počet scanů, většinou bylo měřeno 100 scanů. Před každým měřením bylo změřeno background, které bylo uloženo. V Result spectrum byla nastavena transmittance. Manuálně byl vložen KBr nebo CaF_2 beamspliter, podle rozsahu měření. V Measurment channel byl nastaven tok paprsku a pomocí signal gain, byl zvýšen signál na potřebnou hodnotu, aby pík dosahoval maxima v 20000-25000. V Acquisition byl nastaven rozsah spektra. Nakonec byla zkontrolována správnost signálu.

3.2 Instrumentace

Pro měření byl využíván spektrometr v infračervené oblasti s Fourierovou transformací. Byly využívány různé zdroje záření a detektory, viz. níže.

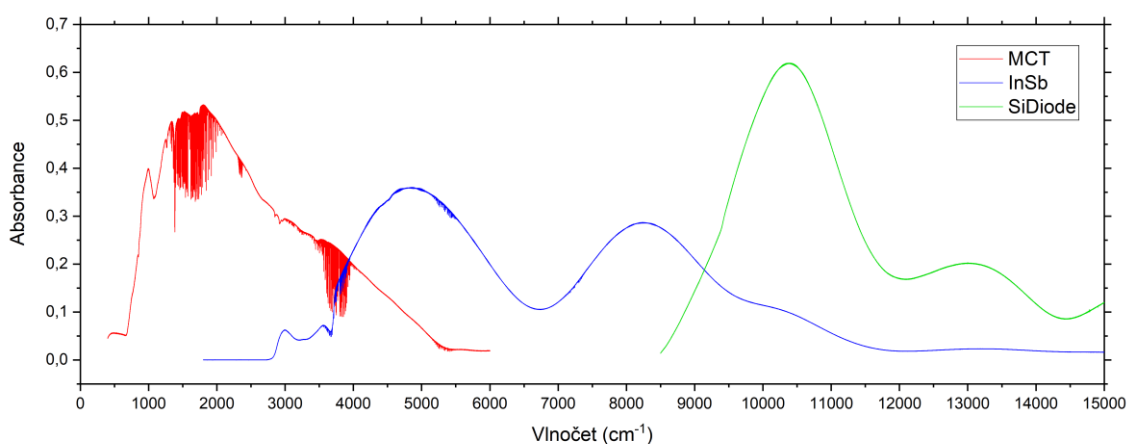
3.2.1 Zdroje záření

Globalar = jedná se o karbid křemíku o šířce 5-10 mm a délce 20-50 mm, který je elektricky zahříván na $1000\text{-}1650 \text{ }^\circ\text{C}$. Tento zdroj se využívá kvůli svému spektrálnímu chování, které přibližně odpovídá chování Planckova zářiče (černé těleso). Tungsten v tomto zdroji jsou použita dopovaná wolframová vlákna uvnitř křemenné obálky plněné vzácnými

plyny a malým množstvím halogenu. Wolfram je zahříván na teplotu 2727 °C. Uvolněný wolfram reaguje s plynným halogenem a wolfram se opět odpařuje na vlákno, tímto způsobem se prodlužuje životnost zdroje. Dále byly použity monokrystalické zdroje Titan a Pluto, které byly testovací. Jednalo se o zdroje vytvořené firmou CRYTUR.

3.2.2 Detektory

MCT = *mercury cadmium telluride*, je polovodič, elektrony v něm obsažené absorbují infračervené světlo a přecházejí z valenčního pásma do vodivého pásma, následně tyto elektrony generují elektrický proud úměrný infračervenému záření. Nevýhoda je, že tento detektor má úzkou šířku měřitelného pásma a snadno se nasycuje. Také je citlivý na teplotu a musí se chladit tekutým dusíkem. Nesprávné chlazení může způsobit špatný signál. [26] InSb tento detektor funguje na stejném principu jako MCT a opět je potřeba chlazení kapalným dusíkem. Velká výhoda MCT a InSb detektorů je rychlá odezva. SiDiode detektor neboli křemíkový detektor má vysoké rozlišení, velký signál a rychlou odezvu. V detektoru je úzký křemíkový proužek. V moment, kdy nabitě částice projdou proužkem způsobí malé ionizační proudy, které lze detekovat a měřit. Tyto detektory je opět potřeba chladit. Na Obr.: 5 vidíme účinnost jednotlivých detektorů.



Obr.:5 Přehledová spektra použitých detektorů

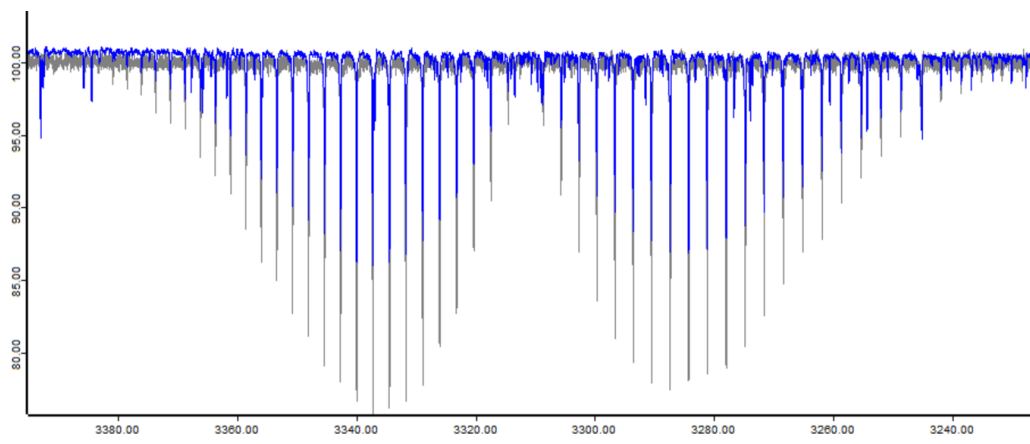
3.2.3 Kyveta

Byly měřeny pouze plynné vzorky. Jelikož plynné látky mají obecně malou absorbanci, je potřeba zvolit delší kyvetu, aby se prodloužila dráha světelného paprsku. V našem případě bylo měřeno ve 20 cm dlouhé kyvetě, nicméně starší data, se kterými jsme nová

data srovnávali, byla pořízena v původní multireflexní kyvetě o optické dráze 30 m. Při srovnání však bylo zjištěno, že i optická dráha 20 cm je pro detekci hlavních komponent naprosto dostatečná.

3.2.4 Způsob vyhodnocení

Na základě minulých měření v každém spektru bylo možno předpokládat vybrané sloučeniny. U cigaret byl seznam sloučenin znám na základě předchozích analýz, u drog jsme měli teoretický přehled sloučenin získaný pomocí kvantově mechanických výpočtů. Vyhodnocování probíhalo srovnávacím způsobem v programu OPUS. Vždy bylo nahráno analyzované spektrum a sloučenina, u které jsme chtěli potvrdit nebo vyvrátit její přítomnost. Na Obr.: 6 je zobrazeno vyhodnocení kyanovodíku v cigaretovém kouři, modrá barva zobrazuje cigaretový kouř, šedivá barva zobrazuje kyanovodík, který byl nahrán z databanky. Příslušné pásy si odpovídají, a proto můžeme určit, že se jedná o kyanovodík. Tímto způsobem, byly vyhodnoceny všechny předpokládané sloučeniny. Problém následně nastal u vyhodnocování drog, jelikož se v nich vyskytuje mnoho příměsí, které nejsme schopni určit. Tento závěr je přínosný pro policii, pro kterou není důležité znát konkrétní složení drog, ale potřebují k sobě přiřadit více vzorků, aby se jim podařilo mapovat distribuční síť organizovaného zločinu.

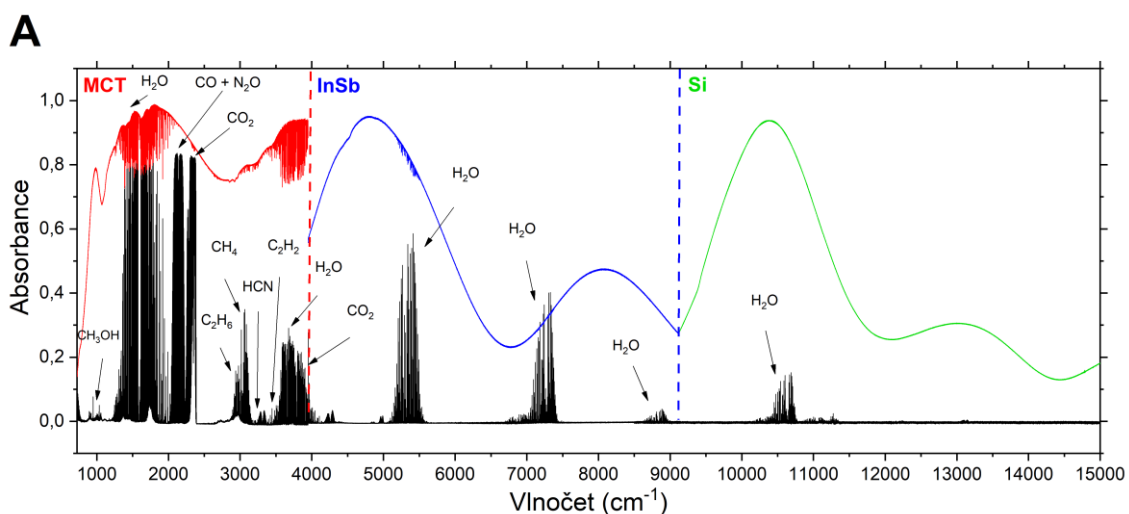


Obr.:6 Vyhodnocení kyanovodíku.

4 Výsledky a diskuse

4.1 Cigarety

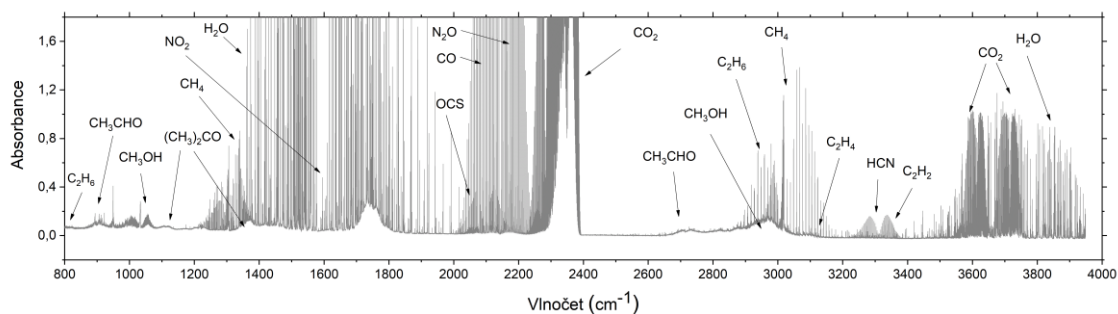
První část bylo změření cigaretového kouře v širokém rozsahu. Jelikož bylo potřebné zvolit různé detektory pro dané vlnové délky, nebylo možné změřit celé spektrum najednou. Na Obr.:7 vidíme cigaretové spektrum, nejvíce sloučenin je v oblasti 800-4000 cm^{-1} . V oblasti nad 4000 cm^{-1} se vyskytuje jen voda. V oblasti nad 9000 cm^{-1} je spektrum vynásobeno 10, jinak by poslední absorpční pás nebyl vůbec vidět. Na obrázku také pozorujeme, jaké detektory byly pro měřenou oblast použity.



Obr.:7 Spektrum cigaretového kouře v rozsahu 800-15000 cm^{-1} společně se spektry detektorů.

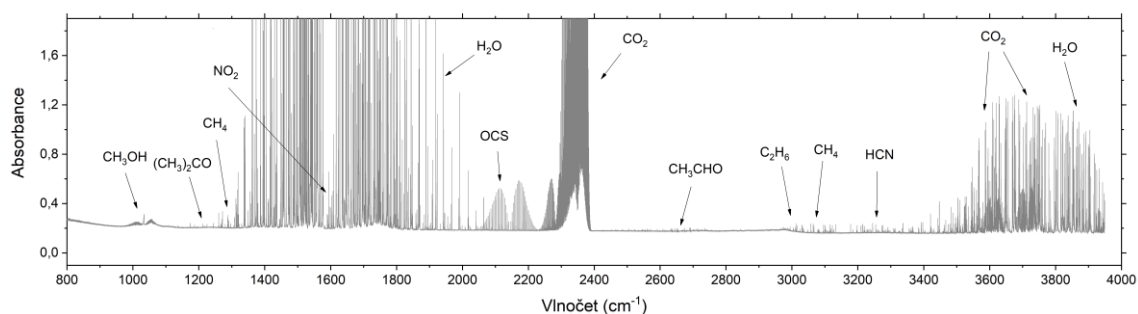
Ve druhé části byl měřen kouř u různých tabákových výrobků. Konkrétně se jednalo o směs cigaretového kouře, vodní dýmku a elektronické cigarety iqos a vaporizér. Přehledová spektra vidíme na Obr.:8-11.

Cigaretový kouř:



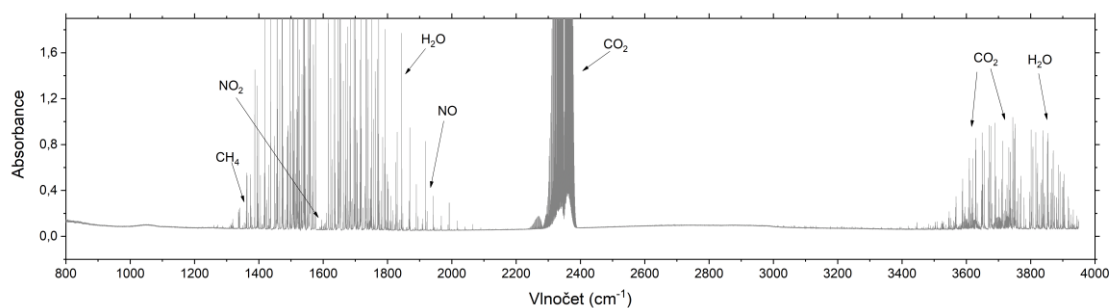
Obr.:8 Infračervené absorpční spektrum směsi cigaretového kouře více značek. Tlak v absorpční cele byl 221,4 torr.

Elektronická cigareta iqos:



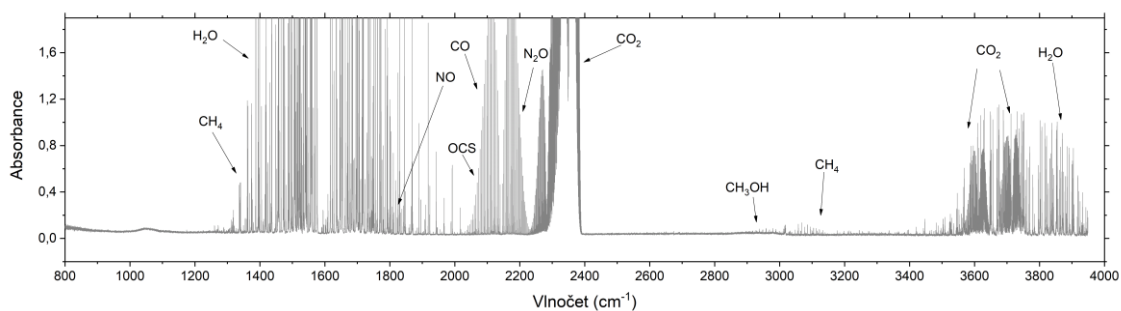
Obr.:9 Infračervené absorpční spektrum kouře z elektronické cigarety iqos. Tlak v absorpční cele byl 380,6 torr.

Vaporizér:



Obr.:10 Infračervené absorpční spektrum kouře z elektronické cigarety typu vaporizéry. Tlak v absorpční cele byl 622,0 torr. Zvětšit

Vodní dýmka:



Obr.:11 Infračervené absorpční spektrum kouře z vodní dýmky. Tlak v absorpční cele byl 624,8 torr. .
zvětšit

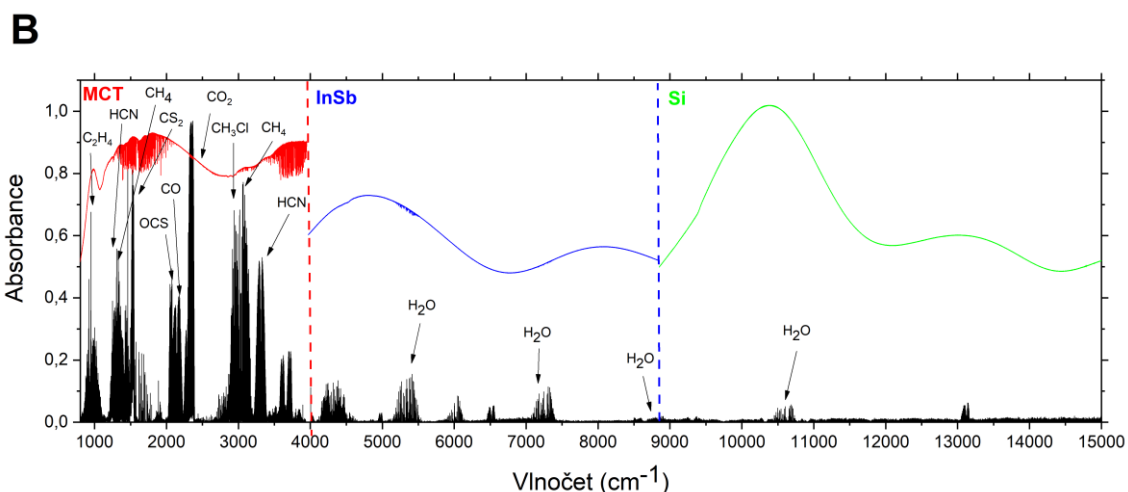
Ve všech vzorcích se vyskytovala voda, oxid uhličitý, oxid uhelnatý a methan. Další sloučeniny vyskytující se v příslušných tabákových výrobcích jsou shrnuty v Tab.:3.

Tab.:3 Látky vyskytující se v jednotlivých tabákových výrobcích.

Látka	Vzorec	Cigareta	Iqos	Vaporizér	Vodní dýmka
oxid uhelnatý	CO	X	X	X	X
oxid uhličitý	CO ₂	X	X	X	X
voda	H ₂ O	X	X	X	X
methan	CH ₄	X	X	X	X
oxid dusnatý	NO			X	X
oxid dusičitý	NO ₂	X	X		
oxid dusný	N ₂ O	X			X
kynovodík	HCN	X			
karbonylsulfid	OCS	X	X		
ethan	C ₂ H ₆	X	X		
acetaldehyd	CH ₃ CHO	X	X		
methanol	CH ₃ OH	X	X		X
ethylen	C ₂ H ₄	X			
aceton	(CH ₃) ₂ CO	X	X		
acetylen	C ₂ H ₂	X			

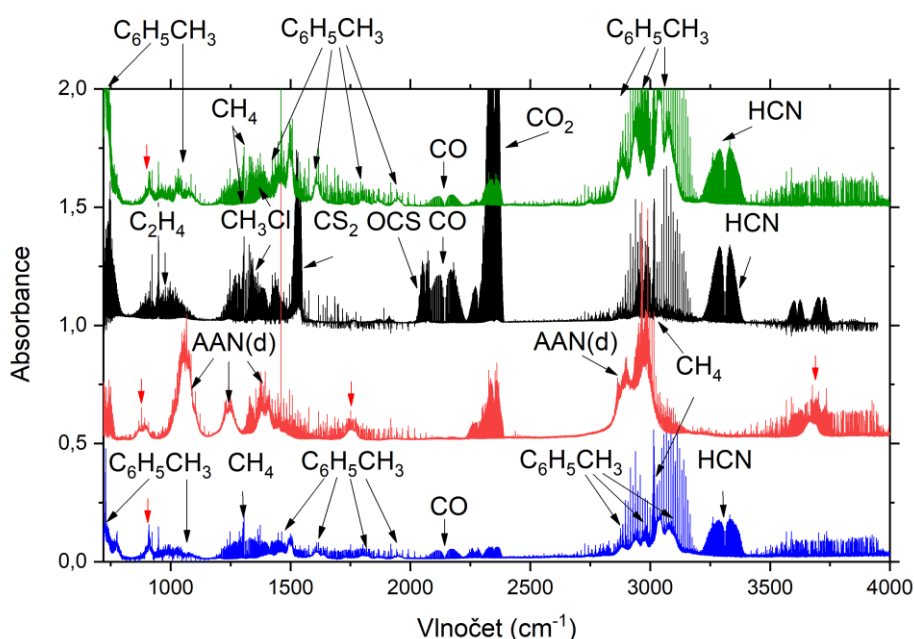
4.2 Drogy

U drog byl měřen kokain v širokém rozsahu, při teplotě 750 °C. Na Obr.:12 pozorujeme, že nejvíce sloučenin je v MIR oblasti. Celé spektrum je vynásobeno 10, aby byly látky dobře viditelné. V oblasti nad 4000 cm⁻¹ vidíme pouze vodu. Na obrázku také pozorujeme, jaké detektory byly pro měřenou oblast použity.



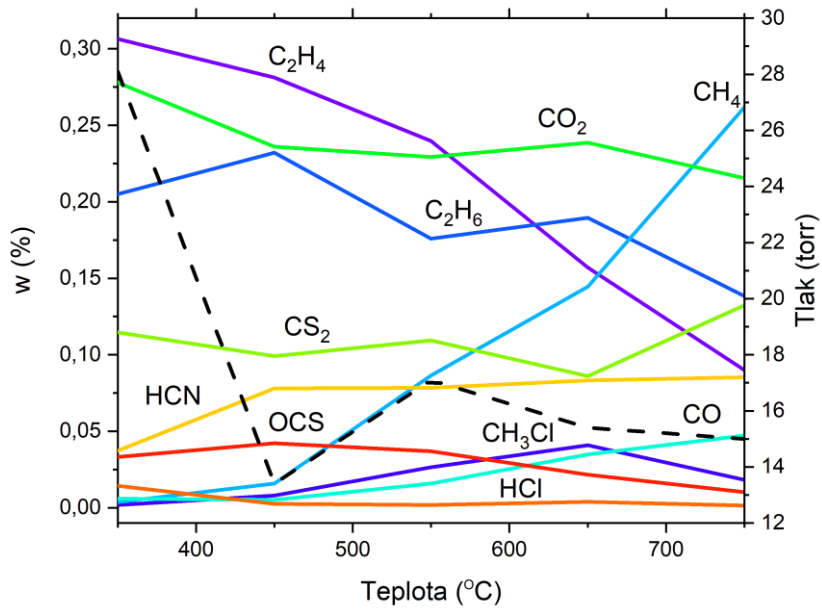
Obr.:12 Spektrum kokainu po termolýze při teplotě 750 °C v rozsahu 800-15000 cm⁻¹ společně se spektry detektorů.

V další části byl měřen kokain a metamfetamin v oblasti 800-4000 cm^{-1} . Na Obr.:13 pozorujeme spektra našich dvou vzorků společně se vzorky měřenými v jiné práci na stejné téma. Vidíme, že ve vzorcích se nacházejí různé látky, které se nám nepodařilo definovat. Tyto látky jsou vyznačené červenými šipkami. Vzhledem k tomu, že se nejedná o čistý kokain a metamfetamin, je velice obtížné určit neznámé látky, protože nevíme, s čím mohou být drogy smíchány. Tato skutečnost značně komplikuje situaci, nicméně na základě těchto specifických produktů je možné určit drogové směsi pocházející od stejného zdroje. Díky tomuto zjištění pak může Policie České republiky udělit vyšší sankce zadrženým osobám.

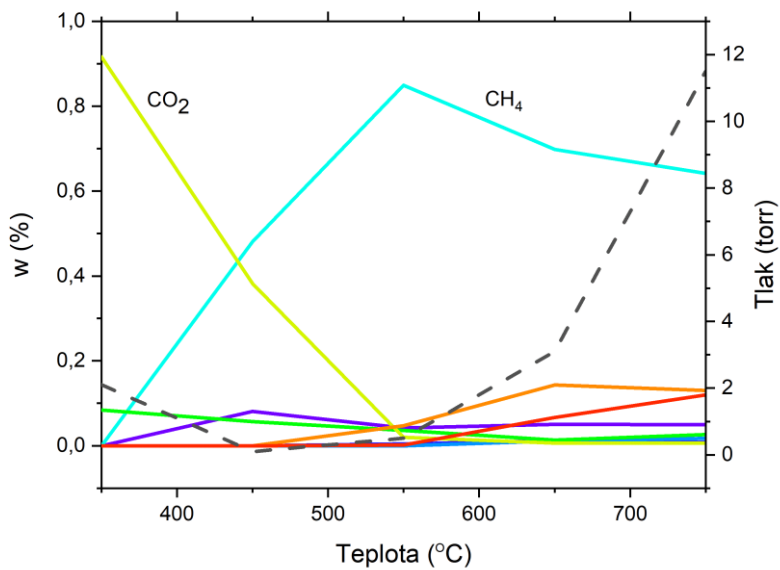


Obr.:13 Specifické látky v drogových směsích (červená šipka ukazuje na neznámé látky). Zelená: 1189 metamfetamin 650 °C, černá: 1281 kokain 750 °C, červená: 1301 kokain 350 °C, modrá: 1213 metamfetamin 650 °C.

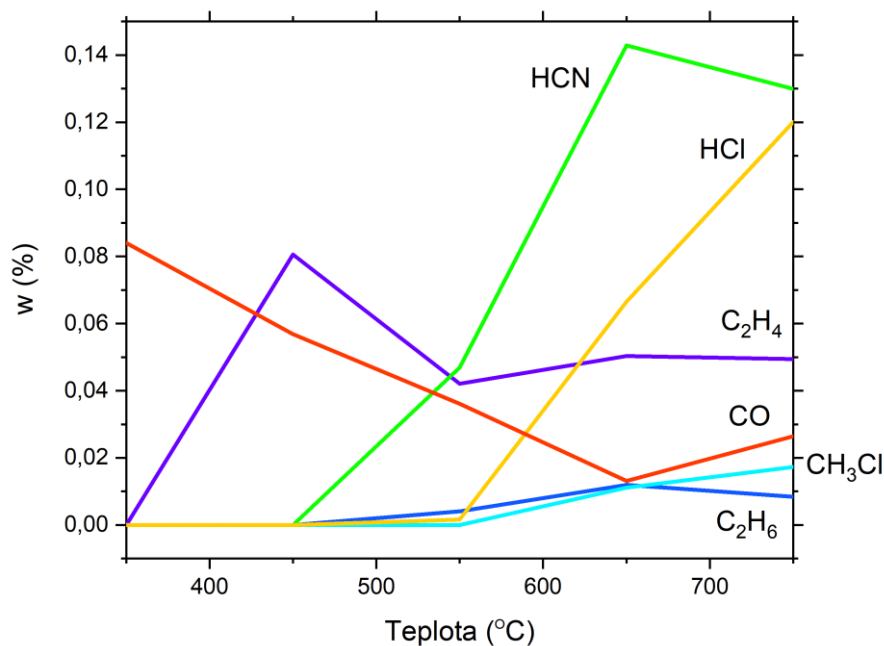
Bylo vypočítáno procentuální zastoupení sloučenin vyskytujících se ve vzorku kokainu 1281 a metamfetaminu 1213 při různých teplotách. Tyto látky jsou zobrazené na Obr.:14-15 U metamfetaminu bylo u methanu a oxidu uhličitého velké procentuální zastoupení, pro přehlednost je Obr.:16 bez těchto sloučenin.



Obr.:14 Procentuální zastoupení sloučenin vyskytujících se v kokainu při různých teplotách. Přerušovaná čára značí tlak.

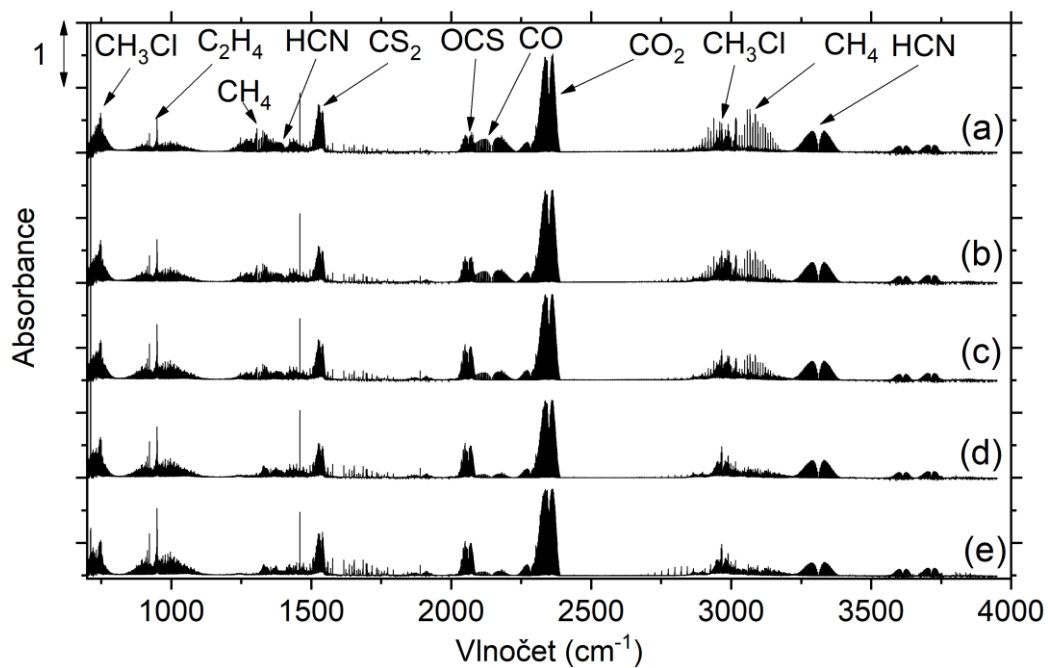


Obr.:15 Procentuální zastoupení sloučenin vyskytujících se v metamfetaminu při různých teplotách. Přerušovaná čára značí tlak.

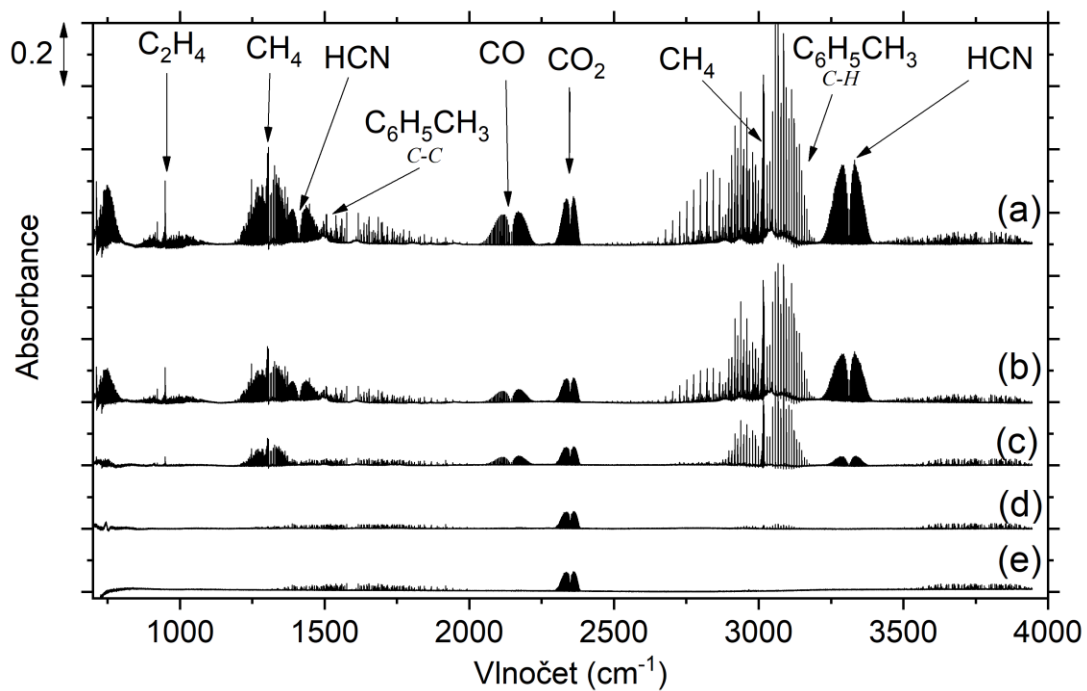


Obr.:16 Procentuální zastoupení sloučenin vyskytujících se v metamfetaminu při různých teplotách bez methanu a oxidu uhličitého

Zajímalo nás, jestli při termolýze se s rostoucí teplotou zvyšuje i koncentrace jednotlivých látek ve drogových směsích. Dále jestli s rostoucí teplotou přibývají či ubývají zjištěné sloučeniny ve spektru. Viz Obr.:17-18 U kokainu pozorujeme jen malé zvyšování obsahu jednotlivých látek, zatímco u metamfetaminu jsou rozdíly mezi teplotou 350 °C a 750 °C hodně výrazné.



Obr.:17 MIR spektra plynných produktů termolýzy kokainu 1281; a) 750 °C, b) 650 °C
c) 550 °C, d) 450 °C, e) 350 °C



Obr.:18 MIR spektra plynných produktů termolýzy metamfetaminu 1213; a) 750 °C,
b) 650 °C, c) 550 °C, d) 450 °C, e) 350 °C

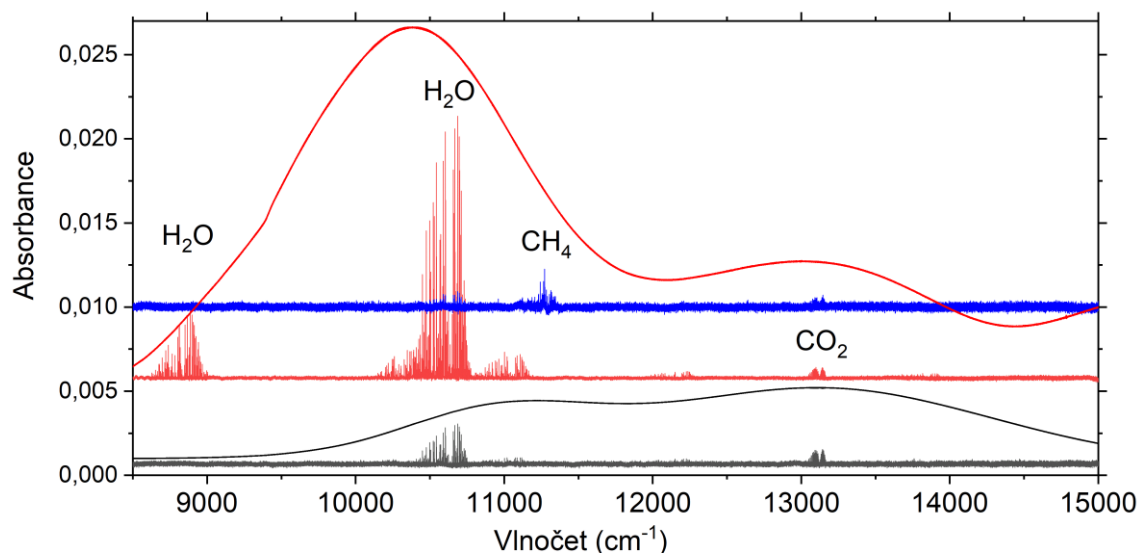
Tab.:4 Látky přítomné ve drogách Nějak tu tabulku vylepšit, takhle není tolik jasná.

Vzorek drogy	Produkty		Teplota	
	Predikce	Detekce	Rozsah	Maximum
Kokain	Oxid uhelnatý	ano	350 - 750	750
	Acetaldehyd	-		
	Benzen	-		
	Acetylen	-		
	Oxid uhličitý	ano	350 - 750	750
	Formaldehyd	-		
	Tetrahydropyridin	-		
	Methan	ano	350 - 750	750
	Ethen		350 - 750	350
	Kyanovodík		350 - 750	750
	Methylchlorid		350 - 750	750
	Sirouhlík		350 - 750	750
	Karbonylsulfid		350 - 750	550
	Metamfetamin	Acetylen	-	
Methan		ano	550 - 750	750
Acetonitril		-		
Benzen		-		
Ethanimin		-		
Acetylen		-		
Acetonitril		-		
Ethen			550 - 750	750
Kyanovodík			650 - 750	750
Toluen			550 - 750	750
Oxid uhelnatý			450 - 750	750
Oxid uhličitý		350 - 750	750	

4.3 Nové zdroje

Jedná se o dva zdroje vyrobené v Turnově firmou CRYTUR, které nesou komerční názvy Titan a Pluto. Jsou to monokrystalické zdroje. V této kapitole jsme chtěli změřit cigaretový kouř pomocí těchto zdrojů a porovnat s běžně využívanými zdroji.

Na Obr.:19 vidíme spektrum cigarety měřené zdrojem Titan. Vidět jsou pouze velmi silné pásy vody a oxidu uhličitého. Výše je ukázáno stejné spektrum měřené pomocí žárovky a nejvýše pak spektrum methanu měřené pomocí zdroje Titan (704 Torr ve 20 cm kyvetě). Ukazuje se, že např. overtone vody kolem 9000 cm^{-1} není pomocí zdroje Titan vidět, protože zdroj má v této oblasti malou účinnost.



Obr.:19 Spektra cigaretového kouře použitím nových zdrojů záření.

5 Závěr

Po provedení analýzy tabákových výrobků můžeme konstatovat, že nejvíce škodlivin obsahují klasické cigarety, následně pak elektronická cigareta iqos. Nejméně škodlivin se našlo ve vaporizéry nicméně byla testována pouze jedna náplň. Cigarety a kokain byly měřeny v širokém spektrálním rozsahu a bylo zjištěno, že všechny sloučeniny se vyskytují zejména v oblasti $800-4000\text{ cm}^{-1}$, nad 4000 cm^{-1} se vyskytovala pouze voda. Vzorky kokainu a metamfetaminu byly termolyzovány ve vakuu při teplotách 350, 450, 550, 650 a 750 °C. Následně bylo vypočítáno procentuální zastoupení zjištěných produktů při jednotlivých teplotách. Kokain i metamfetamin měl nejvyšší kvantitativní zastoupení látek při teplotě 750 °C. Také byly porovnány naměřené látky s teoretickými látkami zjištěnými pomocí výpočtů. Výsledky se velmi lišily. V této práci byla také potvrzena opakovatelnost výsledků u měření drogových směsí, je to tedy vhodná metoda pro použití v praxi. V poslední řadě byly zkoušeny nové monokrystalové zdroje, které jsou použitelné pro analýzu, bude však nutný jejich další technologický vývoj.

6 Literatura

- [1] L. Csémy, Z. Dvořáková, A. Fialová, M. Kodl, M. Skývová, *UZI VA NI TABA KU A ALKOHOLU V C ESKE REPUBLICE 2018*, n.d.
- [2] M.A.H. Russell, M. Jarvis, R. Iyer, C. Feyerabend, *Relation of nicotine yield of cigarettes to blood nicotine concentrations in smokers*, Br. Med. J. 280 (1980) 972–976.
- [3] B. Mayer, *How much nicotine kills a human? Tracing back the generally accepted lethal dose to dubious self-experiments in the nineteenth century*, Arch. Toxicol. 88 (2014) 5–7.
- [4] (No Title), (n.d.). <https://www.solen.cz/pdfs/psy/2003/05/04.pdf> (accessed August 4, 2020).
- [5] M.A.H. Russell, P. V. Cole, M.S. Idle, L. Adams, *Carbon Monoxide Yields of Cigarettes and Their Relation to Nicotine Yield and Type of Filter*, Br. Med. J. 3 (1975) 71–73.
- [6] F.Y. Lee, W.K. Chen, C.L. Lin, C.H. Kao, *Carbon monoxide poisoning and subsequent cardiovascular disease risk a nationwide population-based cohort study*, Med. (United States). 94 (2015) e624.
- [7] W.S. Aronow, *Effect of carbon monoxide on cardiovascular disease*, Prev. Med. (Baltim). 8 (1979) 271–278.
- [8] (A) The Philip Morris International IQOS charger, holder and HeetStick... | Download Scientific Diagram, (n.d.). https://www.researchgate.net/figure/A-The-Philip-Morris-International-IQOS-charger-holder-and-HeetStick-tobacco-stick_fig1_328454686 (accessed August 4, 2020).
- [9] Užívání e-cigaret mezi dětmi: co vše by měli rodiče vědět o e-cigaretách? - Šance Dětem,(n.d.).<https://www.sancedetem.cz/srv/www/content/pub/cs/clanky/uzivani-e-cigaret-mezi-detmi-co-vse-by-meli-rodice-vedet-o-e-cigaretach-248.html> (accessed August 5, 2020).
- [10] R. Wiczorek, G. Phillips, L. Czekala, E. Trelles Sticken, G. O’Connell, L. Simms, K. Rudd, M. Stevenson, T. Walele, *A comparative in vitro toxicity assessment of electronic vaping product e-liquids and aerosols with tobacco cigarette smoke*, Toxicol. Vitr. 66 (2020) 104866.
- [11] P. Gootenberg, *Andean cocaine: the making of a global drug*, University of North Carolina Press, Chapel Hill, 2008.
- [12] H.C. Breiter, R.L. Gollub, R.M. Weisskoff, D.N. Kennedy, N. Makris, J.D. Berke, J.M. Goodman, H.L. Kantor, D.R. Gastfriend, J.P. Riorden, R.T. Mathew, B.R. Rosen, S.E. Hyman, *Acute effects of cocaine on human brain activity and emotion*, Neuron. 19 (1997) 591–611.
- [13] M.E. Wolf, *The Bermuda Triangle of cocaine-induced neuroadaptations.*, Trends Neurosci. 33 (2010) 391–398.

- [14] A.C. Fonseca, J.M. Ferro, *Drug abuse and stroke.*, Curr. Neurol. Neurosci. Rep. 13 (2013) 325.
- [15] I. Riezzo, C. Fiore, D. De Carlo, N. Pascale, M. Neri, E. Turillazzi, V. Fineschi, *Side effects of cocaine abuse: multiorgan toxicity and pathological consequences.*, Curr. Med. Chem. 19 (2012) 5624–5646.
- [16] Marek Blažejovský, n.d.
- [17] Metamfetamin (pervitin), n.d. www.adiktologie.cz (accessed July 30, 2020).
- [18] What are the immediate (short-term) effects of methamphetamine misuse? | National Institute on Drug Abuse (NIDA), (n.d.). <https://www.drugabuse.gov/publications/research-reports/methamphetamine/what-are-immediate-short-term-effects-methamphetamine-misuse> (accessed July 28, 2020).
- [19] S. Moldoveanu, *Pyrolysis of organic molecules with applications to health and environmental issues*, 1st ed, Elsevier, Amsterdam ; Boston, 2010.
- [20] J. Friedrich, *Methods for Bulk Growth of Inorganic Crystals: Crystal Growth*, in: Ref. Modul. Mater. Sci. Mater. Eng., Elsevier, 2016.
- [21] RŮST KRYSTALŮ Z NÍZKOTEPLTNÍCH ROZTOKŮ TEORIE A EXPERIMENT, n.d.
- [22] I. Němcová, L. Čermáková, P. Rychlovský, *Spektrometrické analytické metody* {}, Karolinum, Praha, 2004.
- [23] 9.10: Electronic Spectra of Organic Molecules - Chemistry LibreTexts, (n.d.). [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Book%3A_Basic_Principles_of_Organic_Chemistry_\(Roberts_and_Caserio\)/09%3A_Separation%2C_Purification%2C_Identification_of_Organic_Compounds/9.10%3A_Electronic_Spectra_of_Organic_Molecules](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Book%3A_Basic_Principles_of_Organic_Chemistry_(Roberts_and_Caserio)/09%3A_Separation%2C_Purification%2C_Identification_of_Organic_Compounds/9.10%3A_Electronic_Spectra_of_Organic_Molecules) (accessed July 30, 2020).
- [24] K. Záruba, *Analytická chemie*, 2016.
- [25] Michelson Interferometer, (n.d.). <https://www.mpoweruk.com/figs/Michelson-Interferometer.htm> (accessed July 28, 2020).
- [26] D.-W. Sun, ed., No Title, in: *Infrared Spectrosc. Food Qual. Anal. Control*, Academic Press, San Diego, 2009: pp. 415–424.