

Závěrečná prezentace řešitele projektu NVS IP 2021

Ramanova spektroskopie pro biomedicínské aplikace

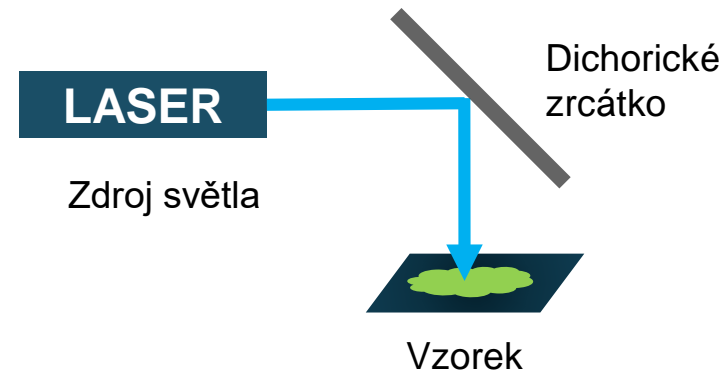
17.1.2022

Václav Petrák

Fakulta biomedicínského inženýrství
ČVUT v Praze

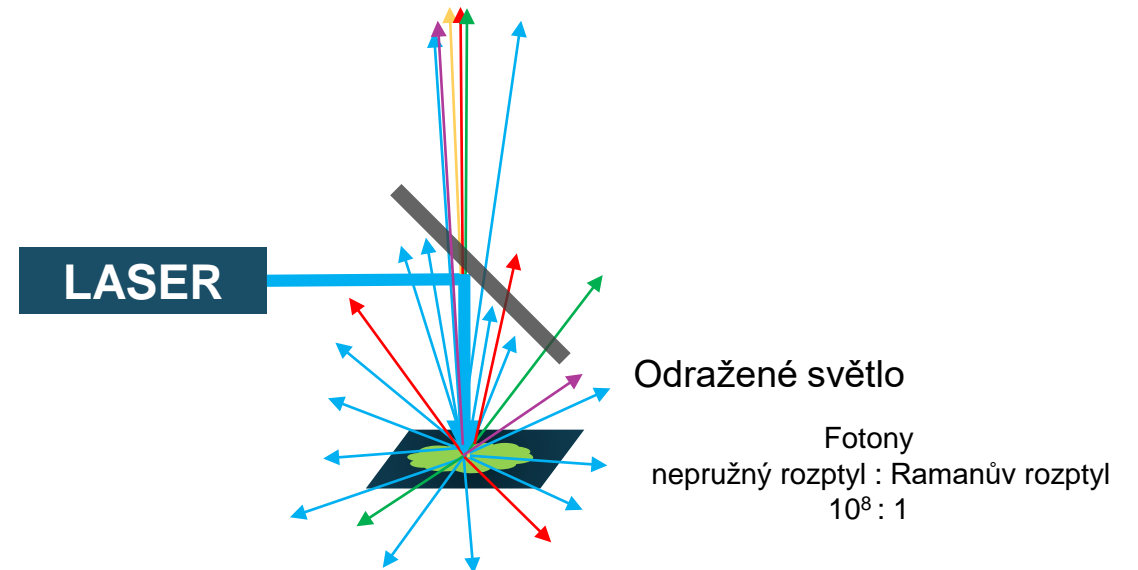
Analytická metoda Ramanova spektroskopie se rozšiřuje v biomedicínském výzkumu

- **Ramanova spektroskopie je spektroskopická metoda který používá k analýze materiálu monochromatické světlo (laser)**
- Využívá nepružný Ramanův rozptyl který vznikající při interakci mezi fotony dopadajícího světla s vibračními a rotačními stavy atomů nebo molekul .
- Rozptýlené záření má jinou vlnovou než dopadající záření.
- Z Ramanova spektra lze odvodit kvalitativní a kvantitativní informace o vzorku materiálu, například:
 - Chemické složení
 - Teplota
 - Mechanické napětí



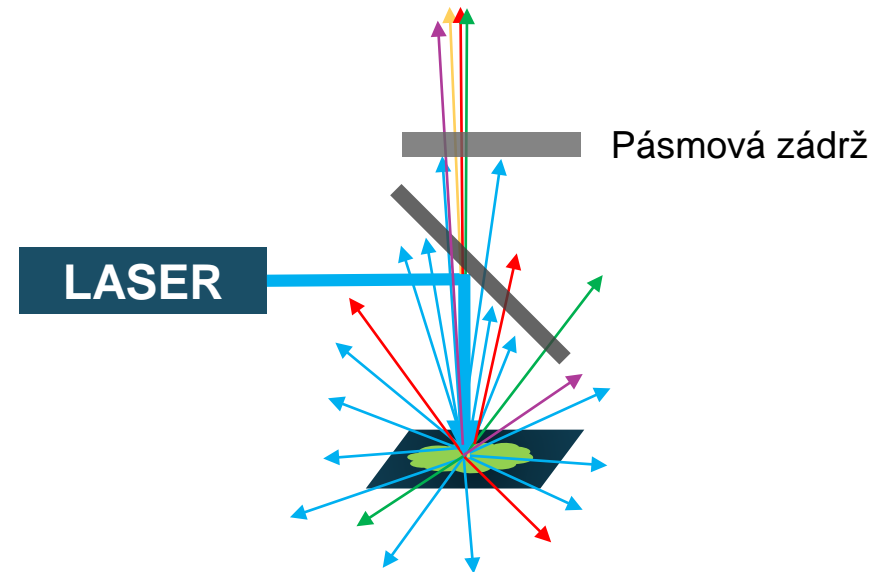
Analytická metoda Ramanova spektroskopie se rozšiřuje v biomedicínském výzkumu

- Ramanova spektroskopie je spektroskopická metoda který používá k analýze materiálu monochromatické světlo (laser)
- **Využívá nepružný Ramanův rozptyl který vznikající při interakci mezi fotony dopadajícího světla s vibračními a rotačními stavy atomů nebo molekul .**
- Rozptýlené záření má jinou vlnovou než dopadající záření.
- Z Ramanova spektra lze odvodit kvalitativní a kvantitativní informace o vzorku materiálu, například:
 - Chemické složení
 - Teplota
 - Mechanické napětí



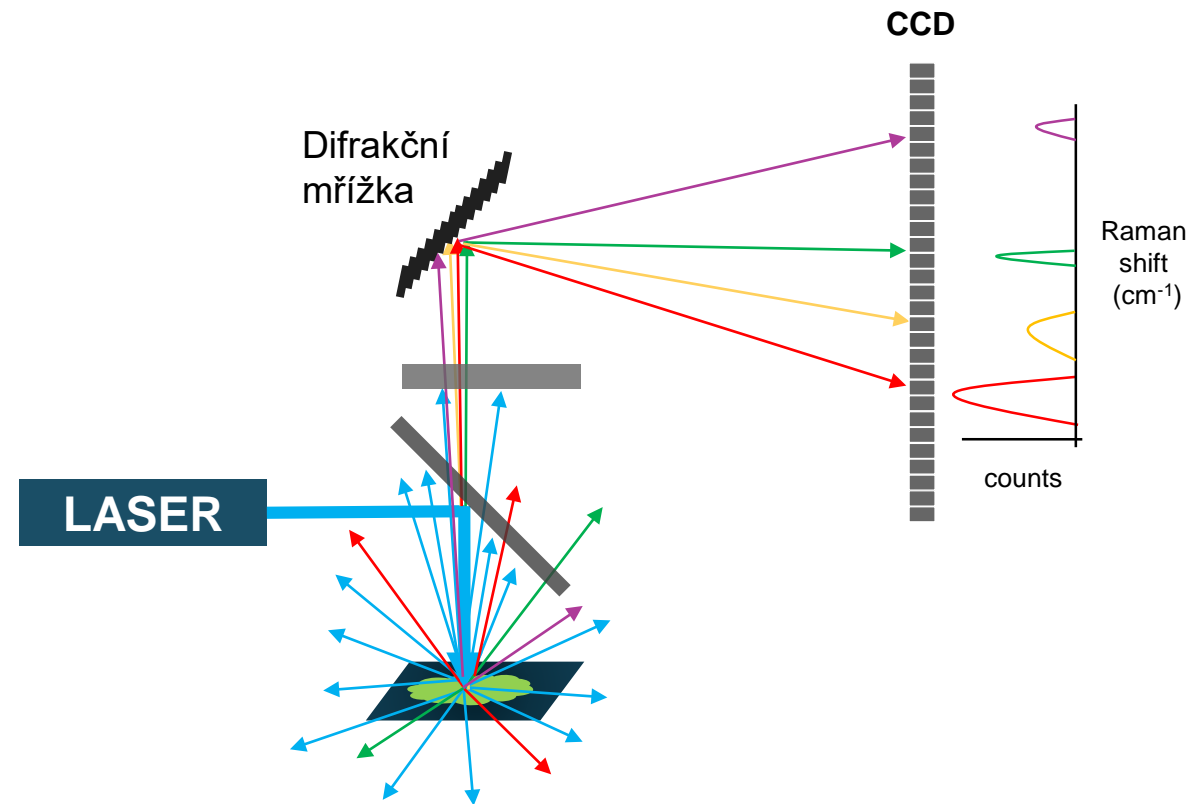
Analytická metoda Ramanova spektroskopie se rozšiřuje v biomedicínském výzkumu

- Ramanova spektroskopie je spektroskopická metoda který používá k analýze materiálu monochromatické světlo (laser)
- Využívá nepružný Ramanův rozptyl který vznikající při interakci mezi fotony dopadajícího světla s vibračními a rotačními stavy atomů nebo molekul .
- **Rozptýlené záření má jinou vlnovou než dopadající záření.**
- Z Ramanova spektra lze odvodit kvalitativní a kvantitativní informace o vzorku materiálu, například:
 - Chemické složení
 - Teplota
 - Mechanické napětí



Analytická metoda Ramanova spektroskopie se rozšiřuje v biomedicínském výzkumu

- Ramanova spektroskopie je spektroskopická metoda který používá k analýze materiálu monochromatické světlo (laser)
- Využívá nepružný Ramanův rozptyl který vznikající při interakci mezi fotony dopadajícího světla s vibračními a rotačními stavy atomů nebo molekul .
- Rozptýlené záření má jinou vlnovou než dopadající záření.
- **Z Ramanova spektra lze odvodit kvalitativní a kvantitativní informace o vzorku materiálu, například:**
 - Chemické složení
 - Teplota
 - Mechanické napětí



Analytická metoda Ramanova spektroskopie se rozšiřuje v biomedicínském výzkumu

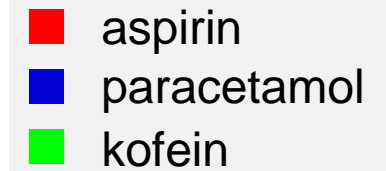
- Ramanova spektroskopie je spektroskopická metoda který používá k analýze materiálu monochromatické světlo (laser)
- Využívá nepružný Ramanův rozptyl který vznikající při interakci mezi fotony dopadajícího světla s vibračními a rotačními stavy atomů nebo molekul .
- Rozptýlené záření má jinou vlnovou než dopadající záření.
- **Z Ramanova spektra lze odvodit kvalitativní a kvantitativní informace o vzorku materiálu, například:**
 - Chemické složení
 - Teplota
 - Mechanické napětí

Analytická metoda Ramanova spektroskopie se rozšiřuje v biomedicínském výzkumu

- Ramanova spektroskopie je spektroskopická metoda který používá k analýze materiálu monochromatické světlo (laser)
- Využívá nepružný Ramanův rozptyl který vznikající při interakci mezi fotony dopadajícího světla s vibračními a rotačními stavy atomů nebo molekul .
- Rozptýlené záření má jinou vlnovou než dopadající záření.
- **Z Ramanova spektra lze odvodit kvalitativní a kvantitativní informace o vzorku materiálu, například:**
 - Chemické složení
 - Teplota
 - Mechanické napětí

Příklad aplikace
Monitorování
rozmístění léčiva v
tabletě

Legenda



Komerční Ramanovy spektroskopy jsou drahé a nejsou primárně navržené pro výuku

Komerční Ramanův spektroskop

Obvykle cena v milionech Kč



Potřeby pro názornou výuku

Levné, snadno nahraditelné součástky

Komerční Ramanovy spektroskopy jsou drahé a nejsou primárně navrženy pro výuku

Komerční Ramanův spektroskop

Obvykle cena v milionech Kč

Pečlivě kalibrováno pro maximální citlivost



Potřeby pro názornou výuku

Levné, snadno nahraditelné
součástky

Kalibraci pro měření zvládne i student

Komerční Ramanovy spektroskopy jsou drahé a nejsou primárně navržené pro výuku

Komerční Ramanův spektroskop

Obvykle cena v milionech Kč

Pečlivě kalibrováno pro maximální citlivost

Komplexní systém z mnoha přídatnými prvky



Potřeby pro názornou výuku

Levné, snadno nahraditelné součástky

Kalibraci pro měření zvládne i student

Systém redukován na nezbytně nutné součástky je snadnější na pochopení

Komerční Ramanovy spektroskopy jsou drahé a nejsou primárně navrženy pro výuku

Komerční Ramanův spektroskop

Obvykle cena v milionech Kč

Pečlivě kalibrováno pro maximální citlivost

Komplexní systém z mnoha přídatnými prvky

Zakrytý, nepřístupný



Potřeby pro názornou výuku

Levné, snadno nahraditelné součástky
Kalibraci pro měření zvládne i student

Systém redukován na nezbytně nutné součástky je snadnější na pochopení

Otevřený, názorný



V projektu jsme sestavili spektroskop z běžně dostupných komponentů a připravili experimentální úlohy

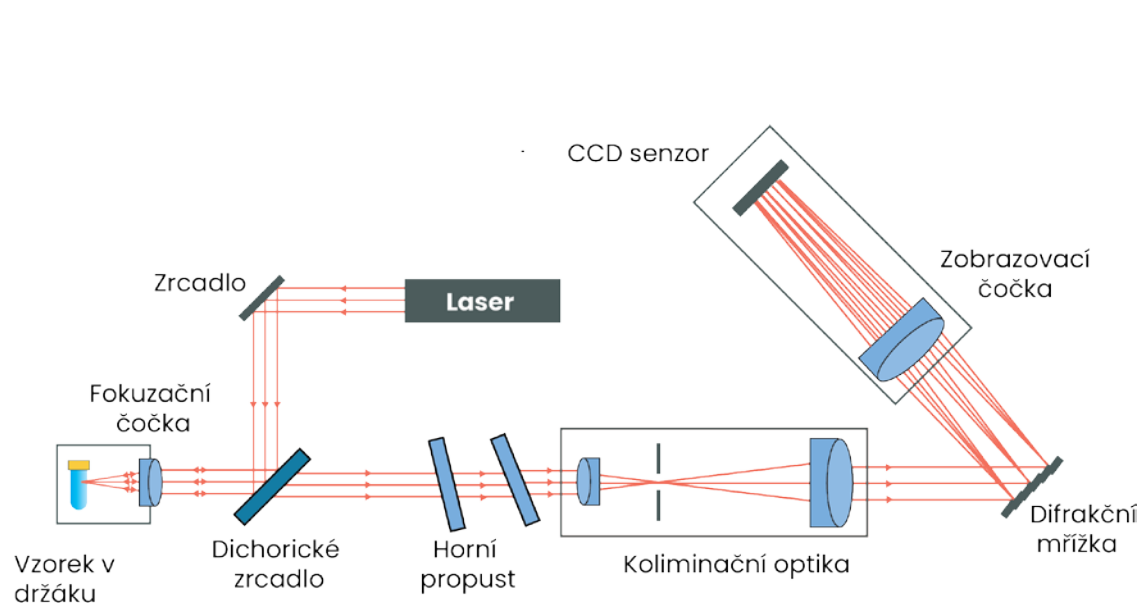
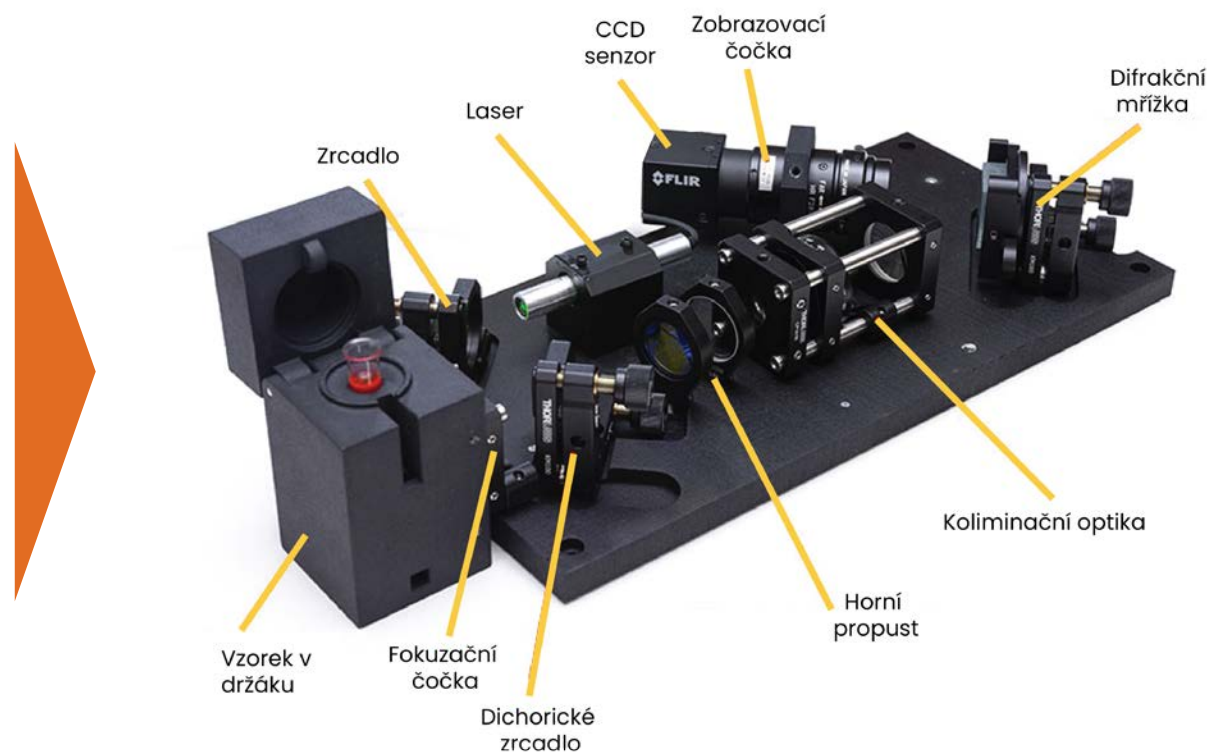


Schéma spektroskopu*

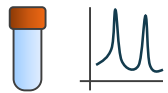


Sestavený spektroskop

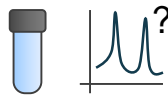
* Spektroskop byl sestaven na základě open source dokumentace OPENRaman

Výsledky projektu jsou dlouhodobě udržitelné a budou využívány v několika předmětech na FBMI ČVUT

Experimentální



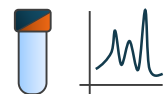
1. Základní charakterizace látek



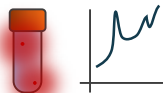
2. Identifikace neznámé látky



3. Vliv doby akvizice na spektrum



4. Kvantifikace obsahu metanolu v etanolu



5. Vliv fluorescence vzorky na spektrum

Úlohy na zpracování dat



1. Odečet pozadí



2. Normalizace spektra

$\text{cm}^{-1} \rightarrow \text{nm}$

3. Přepočet vlnočtu na vlnovou délku



4. Vyhlazení signálu

Uplatnění úloh ve výuce

Nanotechnologie a nanomateriály

1. ročník nMgr. Biomedicínská a klinická informatika se specializací Nanotechnologie

Pokročilá biofotonia

2. ročník nMgr. Biomedicínská a klinická informatika se specializací Nanotechnologie

Optika fyzikální

2. ročník Bc. Optika a Optometrie

Nanoinformatics

2. ročník nMgr. Biomedicínská a klinická informatika se specializací Nanotechnologie

Většina nákladů byla využita k nákupu a výrobě součástek

Materiální náklady:

Součástka	Dodavatel	Cena (Kč)
Optické komponenty jako filtry, držáky, čočky, zrcátko, difrakční mřížka, laser; nářadí k montáži	<i>Thorlabs</i>	65 492
Výroba hliníkových komponent: stůl, držák objektivu a difrakční mřížky	<i>Lintech</i>	12 517
3D tištěné komponenty: kryt difrakční mřížky, držák kyvet	<i>Sharplayers</i>	3 025
CCD senzor: kamera FLIR	<i>W-Technika</i>	20 224
IT a kancelářské potřeby: myš, klávesnice, kancelářské potřeby	<i>Alza.cz</i>	3 699

Služby a náklady nevýrobní povahy

Položka	Cena (Kč)
Jazyková korektura	1 816

Osobní náklady

Odměna cca 3 800 Kč + sociální, zdravotní

Závěr

- Realizovaný projekt zpřístupňuje studentům problematiku Ramanovy spektroskopie a zpracování nahraných spekter.
- Udržitelnost na rok 2022 až 2023 je plánovaná. Projekt byl plánován s výhledem na dlouhodobou udržitelnost.
- Projekt je přínosem pro plnění strategického záměru a plánu realizace strategického záměru ČVUT, které má za cíl zapojovat praxi do výuky a využití znalostí v praxi.
 - Úlohy přináší studentům snadno přístupnou formou spektroskopickou metody, se kterou se mohou setkat v praxi. Díky atraktivní *hands-on* formě připravených cvičení je zvýšená šance vzbudit u studentů zájem o téma Ramanovy spektroskopie. Jednoduchost uspořádání usnadňuje pochopení funkce jednotlivých částí systému i pochopení fyzikálního principu metody.
- Na stránkách fbmi.cvut.cz/ip je zveřejněna [závěrečná zpráva](#) a [výstupy](#) projektu.

Přehled čerpání

1 Kapitálové finanční prostředky:					
		Požadavek dotace z IP (tis.Kč):	Přidělená dotace na IP z MŠMT (tis.Kč):	Čerpání přidělené dotace (tis. Kč):	
1.1	Dlouhodobý nehmotný majetek (SW, licence):	0	0	0	
1.2	Samostatné věci movité (stroje, zařízení):	0	0	0	
	Celkem:	0	0	0	
2 Běžné finanční prostředky celkem					
	Osobní náklady:	Požadavek dotace z IP (tis.Kč):	Přidělená dotace na IP z MŠMT (tis.Kč):	Čerpání přidělené dotace (tis. Kč):	Čerpání spoluúčasti katedry (tis. Kč):
2.1	Mzdy (včetně pohyblivých složek):	4	4	4	0
2.2	Odměny dle dohod o pracích konaných mimo pracovní poměr:	0	0	0	0
2.3	Odvody pojistného na veřejné zdravotní pojištění a pojistného na sociální zabezpečení a příspěvku na státní politiku zaměstnanosti a přídělky do sociálního fondu:	1	1	1	0
	Celkem:	5	5	5	0
	Ostatní:	Požadavek dotace z IP (tis.Kč):	Přidělená dotace na IP z MŠMT (tis.Kč):	Čerpání přidělené dotace (tis. Kč):	Čerpání spoluúčasti katedry (tis. Kč):
2.4	Materiální náklady (včetně drobného majetku):	101	0	105	0
2.5	Služby a náklady nevýrobní:	0	0	2	0
2.6	Cestovní náhrady:	0	0	0	0
2.7	Stipendia:	6	0	0	0
	Celkem:	107	107	107	0
3	Celkem běžné a kapitálové finanční prostředky:	112	112	112	0

Zdůvodnění změn

- **2.4 Materiální náklady:** Plánovaná částka 101 tis. Kč, skutečně čerpáno 105 tis. Kč. Důvodem je zdražení kamery FLIR, která slouží jako senzor. Ke zdražení došlo během běhu projektu.
- **2.5 Služby a náklady nevýrobní:** Plánovaná částka 0 Kč, skutečně čerpáno 2 tis. Kč. Původně měli dělat nezávislou revizi textu studenti. Kvůli nezájmu studentů o práci na projektu byla práce realizovaná formou DPP.
- **Stipendia:** Plánovaná částka 6 tis. Kč, skutečně čerpáno 0 tis. Kč. Na projekt se oproti původnímu plánu nepřihlásil žádný student.