

# **STŘEDOŠKOLSKÁ ODBORNÁ ČINNOST**

**Obor č. 3: Chemie**

## **Multiparametrický monitoring kvality ovzduší s využitím moderních analytických metod**

**Plachý Marek  
Ústecký kraj**

**Ústí nad Labem 2023**

# STŘEDOŠKOLSKÁ ODBORNÁ ČINNOST

Obor č. 3: Chemie

**Multiparametrický monitoring kvality ovzduší  
s využitím moderních analytických metod**

**Multiparametric monitoring of air quality  
utilizing modern analytic methods**

**Autor:** Marek Plachý

**Škola:** Gymnázium, Ústí nad Labem, Jateční 22, p. o.

**Adresa:** Jateční 243/22, 400 01 Ústí nad Labem

**Kraj:** Ústecký kraj

**Konzultant:** Ing. Dominik Pilnaj

Ústí nad Labem 2023

## Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou práci SOČ vypracoval samostatně a použil jsem pouze prameny a literaturu uvedené v seznamu bibliografických záznamů.

Prohlašuji, že tištěná verze a elektronická verze soutěžní práce SOČ jsou shodné.

Nemám závažný důvod proti zpřístupňování této práce v souladu se zákonem č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších předpisů.

V Ústí nad Labem dne 28. 1. 2023

.....  
Marek Plachý



## Poděkování

K vybranému problému mě přivedl zájem o kvalitu životního prostředí a o moderní analytické technologie, se kterými jsem měl možnost se blíže seznámit během vzdělávací akce s názvem EKO-KEMP, jež byla pořádána v rámci projektu U21-REPROREG<sup>1</sup>. Později mě zaměstnanec Fakulty životního prostředí Univerzity Jana Evangelisty Purkyně oslovil s dotazem, zdali bych měl zájem mu vypomáhat. Odměnou za to mi ochotně poskytl cenné znalosti, z nichž jsem během práce čerpal. Později mi pomáhal též se samotnou realizací práce, poskytoval k ní konzultace, a především mě pak podporoval v tom, abych ji dotáhl do zdárného konce. Tímto bych chtěl Ing. Dominiku Pilnajovi vyjádřit své poděkování.

Své poděkování bych chtěl vyjádřit i svému učiteli chemie, Mgr. Romanu Toldemu, jenž ve mně prostřednictvím svých poutavých výkladů probudil zápal pro tento fascinující obor. Nutno také dodat, že svou práci jsem do soutěže SOČ přihlásil jen díky jeho iniciativě.

Se strukturací a sémantikou samotné práce mi pomohla publikace Jak (úspěšně) napsat závěrečnou práci od Petra Polstera. [9]

Tato práce by nebyla možná bez věcné podpory mé rodiny.

Zvláště bych chtěl poděkovat panu Ing. Petrovi Koutníkovi za provedení SEM analýzy.

---

<sup>1</sup> U21 – Univerzita reflektující problémy regionu severozápadních Čech – CZ 02.2.69/0.0/0.0/18\_058/0010208

## **Anotace**

Tato práce porovnává možnosti a aplikace moderních analytických technik pro monitoring stavu ovzduší. Jmenovitě bylo využito plynové chromatografie s vysoko-rozlišovací hmotnostní spektrometrií, skenovací elektronové mikroskopie a sady senzorických měření pro korelaci dat v čase. Kombinace zvolených analytických metod přináší komplexní náhled na stav znečištění ovzduší. Odběr vzorku zajistily sorpční trubice s aktivním uhlím, respektive teflonové membrány v kaskádovém impaktoru. Byla provedena dvě zkušební měření - první ve vnitřních prostorách budovy Centra přírodovědných a technických oborů FŽP UJEP a druhé na její střeše. Data vykazují jednoznačné trendy nárůstu koncentrací polutantů v průběhu dne. Ke zpřesnění monitoringu stavu ovzduší ve městě Ústí nad Labem a jeho okolí lze ze zkonstruovaných měřících jednotek vybudovat měřící síť s možností vzdálené správy i sběru dat. Na základě provedených měření byl identifikován možný původ polutantů a byly uvedeny jejich zdravotní rizika. V závěru byla diskutována iniciativa Ústeckého kraje a jeho orgánů ve vztahu k ochraně životního prostředí.

## **Klíčová slova**

Senzorika atmosféry; těkavé organické látky; aerosoly

## **Annotation**

The paper you are about to read compares the possibilities of modern analytical techniques and their applications in ambient air quality monitoring. HR-GCMS, SEM and a set of sensor measurements for time correlation were applied. The combination of the selected analytical methods provides a complex view of air pollution. Sampling was conducted using activated charcoal sorption tubes and PTFE membranes in a cascade impactor, respectively. Two experimental measurements were carried out - first inside the building of the UJEP Centre for Natural Technology Sciences, and second on the roof of the building. The data show clear trends of increasing pollutant concentrations during the day. In order to improve air monitoring in the town of Usti nad Labem and its surroundings, the installed measuring units can be connected into a network with the possibility of remote control and collection of data. Based on conducted measurements, possible sources of pollutants were identified, and their health risks were mentioned. Finally, the initiative of the Ustecky region and its authorities toward the environment was discussed.

## **Keywords**

atmospheric sensors; volatile organic compounds; aerosols

# Obsah

1	Úvod.....	11
2	Teoretická příprava .....	12
2.1	Těkavé organické látky (VOC) .....	13
2.1.1	Adsorpce na aktivní uhlí .....	13
2.1.2	Plynová chromatografie (GC).....	14
2.1.3	Hmotnostní spektrometrie (MS) .....	15
2.2	Mikrosvět vzdušných částic .....	16
2.2.1	Kaskádový impaktor .....	16
2.2.2	Skenovací elektronová mikroskopie (SEM) .....	17
2.3	Elektronické senzory .....	17
3	Metodika .....	18
3.1	Použité senzory .....	19
3.1.1	Fyzikální senzory .....	20
3.1.2	Elektrochemické senzory .....	21
3.1.3	Foto-ionizační detektor (PID) .....	22
3.1.4	Senzor rozptylu světla.....	23
3.2	Instalace senzorů .....	24
3.2.1	Hardwarové řešení .....	24
3.2.2	Softwarové řešení.....	26
3.2.3	Zpracování dat .....	28
3.3	Odběr těkavých látek.....	32
3.4	Identifikace těkavých organických látek.....	33
3.5	Analýza prachových částic.....	33
4	Výsledky .....	34
4.1	Senzorická měření .....	34
4.2	Těkavé organické látky .....	36
4.3	Snímky z elektronového mikroskopu.....	38
5	Interpretace dat.....	43
6	Diskuse.....	46
7	Závěr .....	47
8	Bibliografie .....	48
9	Seznam obrázků, tabulek a grafů .....	49

## Přehled použitých zkratek

Považuji za vhodné upozornit, že některé zkratky nemají v českém jazyce ustálenou obdobu, z toho důvodu byly přeloženy jen volně.

**ACK** – Acknowledgement byte – (*potvrzovací bajt*)

**CPTO** – Centrum přírodovědných a technických oborů –  
– Centre for Natural Sciences and Technology

**CSV** – Comma Separated Values – (*čárkou oddělené hodnoty*)

**EDXS** – Energy Dispersion X-Ray Spectroscopy

**ČHMÚ** – Český hydrometeorologický ústav – Czech Hydrometeorological Institute

**ČIŽP** – Česká inspekce životního prostředí – Czech Environmental Inspectorate

**DDMUL** – Dům dětí a mládeže v Ústí nad Labem – Children and Youth Usti nad Labem

**FŽP** – Fakulta životního prostředí – Faculty of Environmental Science

**GC** – Gas Chromatography – plynová chromatografie

**HRMS** – High Resolution Mass Spectroscopy – vysokorozlišovací hmotnostní spektrometrie

**CHMI** – Czech Hydrometeorological Institute – Český hydrometeorologický ústav

**GND** – Ground – Zem (*společný „odtok“ napětí*)

**I<sup>2</sup>C** – Inter-Integrated Circuit [pronounced: eye-squared-see] – (*sběrnice*)

**ICUK** – Inovační centrum Ústeckého kraje – Innovation Centre of the Usti region

**MS** – Mass Spectroscopy – hmotnostní spektrometrie

**NIST** – National Institute of Standards and Technology –  
– Národní institut standardů a technologií (Ministerstvo obchodu USA)

**PID** – Photo-ionisation Detector – foto-ionizační detektor

**PM** – Particulate Matter – pevné částice

**PSA** – Polar surface area – (*plocha polárního porchu*)

**qTOF** – Quadrupole Time-of-Flight - (*kvadrupólový analyzátor doby letu*)

**SCL** – Serial Clock – (*sériová časovací linka*)



**SDA** – Serial Data – (*sériová datová linka*)

**SEM** – Scanning Electrone Microscopy – skenovací elektronová mikroskopie

**SMB / (SMBus)** – System Management Bus – (*sběrnice*)

**UART** – Universal Asynchronous Receiver-Transmitter – (*sběrnice, komunikační protokol*)

**UJEP** – Univerzita Jana Evangelisty Purkyně – University of Jan Evangelista Purkynje

**VCC** – Voltage Common Colector – (*společný kolektor napětí*)

**VOC** – Volatile Organic Compounds – těkavé organické látky

## Přehled použitých jednotek

**cm<sup>3</sup>** – kubický centimetr = 0.001 L

**Da** – dalton =  $1.661 \cdot 10^{-27}$  kg [2]

**eV** – elektronvolt =  $1.602 \cdot 10^{-19}$  J

**Hz** – hertz = s<sup>-1</sup>

**mW** – miliwatt = 0.001 W

**nm** – nanometr =  $10^{-9}$  m

**ppb** – particles per bilion = 0.001 ppm [3]

**V** – volt

**μg** – mikrogram =  $10^{-9}$  kg

**μl** – mikrolitr =  $10^{-6}$  L

**μm** – mikrometr =  $10^{-6}$  m [4]

---

<sup>2</sup> Dříve označována též jako **amu** – atomic mass unit – atomová hmotnostní jednotka.

<sup>3</sup> Volně přeložitelné jako „částic na miliardu“.

<sup>4</sup> Běžné užíván též jako „mikron“.

## **Použité HW a SW technologie**

**Agilent 7250 qTOF – Agilent** – Hmotností spektrometr

**Agilent 7890B – Agilent** – Plynový chromatograf

**Anasorb CSC – SKC** – Sorbční trubičky s aktivním uhlím

**BME680 – Bosch Sensortech** – Atmosferický senzor teploty, vlhkosti, tlaku a VOC

**BMP120 – Bosch Sensortech** – Atmosferický senzor teploty a tlaku

**JSM-IT800 – Jeol** – Elektronový mikroskop

**Matplotlib – The Matplotlib development team** – Knihovna pro vykreslování grafů

**NO2-A1 – Alphasense** – Elektrochemický senzor oxidu dusíku

**Notepad++ – Don Ho** – Textový editor / programovací prostředí

**Pandas – Wes McKinney** – Knihovna pro zpracování dat

**PID-AH2 – Alphasense** – Elektrochemický senzor těkavých organických látek

**Python 3.6 – Python Software Foundation** – Interpretovaný programovací jazyk

**Raspberry Pi 4B+ (4GB) – Raspberry Pi Foundation** – Mikro počítač s operačním systémem

**RaspbianOS – Raspberry Pi Foundation** – Debianovský operační systém pro Raspberry Pi

**Sioutas five-stage – SKC** – Kaskádový impaktor

**SKC Leland Legacy – SKC** – Kalibrovaná pumpa ke kaskádovému impaktoru

**SKC Touch – SKC** – Kalibrovaná pumpa k sobčným trubicím

**SO2-A4 – Alphasense** – Elektrochemický senzor oxidu síry

**SPS30 – Sensirion** – Senzor prachových částic

**VZ89TE – Amphenol** – Elektrochemický senzor CO<sub>2</sub> a VOC

# 1 ÚVOD

Problematika životního prostředí v Ústeckém kraji trápí obyvatele dlouhodobě. Ochranu životního prostředí vnímám jako problematiku komplexní, a proto si myslím, že k jejímu řešení se má i komplexně přistupovat. Vědecká metoda nabízí různorodé analytické techniky, které lze efektivně kombinovat pro získání uceleného náhledu na stav životního prostředí.

Cílem práce bylo identifikovat látky přítomné v ovzduší prostřednictvím kombinace různých analytických metod. Byla diskutována výhodnost použitého řešení oproti postupům běžně uplatňovaným v praxi. Na základě získaných komplexních dat a rešerše byl identifikován možný původ těchto látek a jejich vliv na životní prostředí Ústeckého kraje. Přes veškerou iniciativu, kterou jeho orgány již vykonaly, zůstává vzhledem k silně průmyslové minulosti kraje potenciál na jeho obnovu vysoký. Zvýšené koncentrace diskutovaných látek v ovzduší mohou představovat zdravotní rizika. Z toho důvodu byla navržena možná řešení pro jejich minimalizaci.

Byly provedeny dva 24hodinové experimenty s odběrem těkavých organických látek a prachových částic. Zároveň byly senzory měřeny koncentrace těchto polutantů, pro určení jejich vývoje v průběhu dne. Odběry byly provedeny dne 7. 9. 2022 na půdě Fakulty životního prostředí Univerzity Jana Evangelisty Purkyně. První z experimentů byl proveden ve frekventovaných vnitřních prostorech budovy Centra přírodovědných a technických oborů, druhý poté na střeše budovy.

Díky této práci jsem si rozšířil své obzory na poli analytické chemie, která je důležitá právě proto, neboť nám umožňuje sestavit detailní popis skutečnosti, na základě kterého, lze pak předpovědi dalších chemických oborů zasadit do reality. Během práce se mi podařilo neuvěřitelně posunout mé programovací schopnosti, zhodnotil jsem své znalosti elektroniky a vyzkoušel jsem si práci s mikropočítačem. V neposlední řadě vidím v této práci potenciál, posunout mě zase o něco blíže k plnění mých cílů týkajících se aplikace moderních technologií pro zkvalitňování životní úrovně v Ústeckém regionu.

## 2 TEORETICKÁ PRŮPRAVA

Pro realizaci experimentů a správnou interpretaci získaných dat bylo nezbytné pochopit základní princip funkce jednotlivých technik záchytu vzorku (sorpce VOC na aktivní uhlí, aerosolů na kaskádový impaktor) i analytických technik využitých k identifikaci a interpretaci původu znečištění. Níže je uveden obecný přehled aplikovaných technologií a jejich princip.

K získání dat bylo využito trojkombinace moderních analytických metod. Jedná se o senzorická měření, plynovou chromatografii s hmotnostní spektrometrií a elektronovou mikroskopií. Každá z uvedených metod poskytuje různé informace a liší se interpretací i účelem použití. Je prací analytického chemika, aby navrhl, jaká z metod je pro konkrétní problém nejvhodnější. V případě komplexního problému, jako je třeba sledování ovzduší, ale není rozumné spoléhat se na jedinou metodu a věřit, že dokáže zodpovědět veškeré otázky.

Důvodem, proč byla zvolena právě tato kombinace metod, je skutečnost, že má velmi široký záběr. Umožňuje sledovat ovzduší z vícera možných úhlů. Jednotlivé metody se navíc doplňují, výsledkem čehož je komplexní náhled na stav atmosféry.

## 2.1 Těkavé organické látky (VOC)

Těkavé organické látky, často zkracované pod zkratkou VOC (z anglického Volatile Organic Compounds), jsou látky běžně přítomné v přírodě, kde slouží především jako prostředek komunikace mezi organismy. Zástupci hmyzu je používají ke koordinaci společenstva, vyšší živočichové k signalizaci během období reprodukce, rostliny k přilákání opylovačů, a dokonce jsou již známy případy komunikace i mezi rostlinami samotnými. [1] [2] Tito činitelé produkují těkavé organické látky zpravidla v nízkých, zdraví-nezávadných<sup>5</sup> koncentracích.

Oproti tomu v případě antropogenních mobilních či stacionárních zdrojů již koncentrace těkavých organických látek dosahují výrazně vyšších hodnot, zvláště pokud se kumulují v uzavřených, nevětraných prostorech. Riziková není ani tak samotná přítomnost jednotlivých látek jako takových, ale především jejich koncentrace. Ničivé projevy těchto látek na těle se postupně kumulují (mnohdy i přítomnost látek v těle), což může způsobit závažné zdravotní komplikace především v dlouhodobém časovém horizontu.

Nejčastějším činitelem zodpovědným za antropogenní zdroje VOC je bezpochyby nedokonalé spalování.<sup>6</sup> Organické látky hořící za nízkých teplot při nedostatečném přísunu kyslíku přecházejí do ovzduší buď v nepozměněné podobě, či různě rozštěpené, nebo mohou vznikat tzv. radikály. Radikály jsou nestabilní částice vznikající mj. rozpadem molekul, jež mají silnou tendenci reagovat s ostatními molekulami či sami se sebou, a utvářet tak nové celky, výsledkem čehož jsou mnohdy látky ještě toxičtější. V ideálním případě vzniká při hoření uhlovodíků pouze vodní pára a oxid uhličitý, což jsou všeobecně látky méně škodlivé.

Těkavé organické látky se vyznačují několika fyzikálními vlastnostmi, především nízkým bodem varu a vysokou tenzí par. V praxi to znamená, že se vypařují již při nízké teplotě a závratnou rychlostí. Konkrétní hodnoty příslušných veličin se napříč různými látkami liší – této skutečnosti bude také využito k jejich separaci a identifikaci.

Z chemického hlediska se nejčastěji jedná nižší uhlovodíky, terpeny či jejich oxoderiváty.

### 2.1.1 Adsorpce na aktivní uhlí

Pojem adsorpce označuje děj, při kterém se částice, zpravidla plynné či kapalně fáze, zachycují na povrchu fáze pevné – tzv. sorbentu. Hlavní původcem tohoto děje jsou takzvané van der Waalovy síly, což jsou slabé nevazebné interakce, jež jsou zapříčiněny vzájemným ovlivňováním nabitých částic. Van der Waalovy síly jsou zodpovědné mj. například za povrchové napětí vody či adhezi končetin hmyzu ke svislé okenní tabuli.

---

<sup>5</sup> Možnou výjimkou by mohla být senzitivní, na alergie trpící část populace, neboť tyto látky jsou doprovázeny pestrou škálou pachů, vůní a mají všeobecně dráždivý charakter.

<sup>6</sup> <https://www.eea.europa.eu/themes/air/explore-air-pollution-data>

Pro úplnost je žádoucí uvést, že původcem adsorpce mohou být ještě interakce chemické, (označované také jako chemisorpce) kdy mezi volnou částicí a částicí na povrchu sorbentu vznikne slabá kovalentní vazba a pozorovat lze i interakce elektrostatické, způsobené lokálním rozdílem náboje. Těchto interakcí nebylo při experimentu využito.

Množství zachycených částic závisí jednak na jejich koncentraci, kterou, vzhledem k tomu že je totožná s měřeným vzorkem, nelze ovlivnit, a jednak na celkovém povrchu sorbentu, který již ovlivnit lze. Běžným způsobem, jak toho lze v praxi dosáhnout, je použití aktivního uhlí.

Aktivní uhlí má vysoký aktivní povrch. Vyrábí se termickým rozkladem organické hmoty, nejčastěji dřeva či skořepin kokosových ořechů. Během něj se z hmoty odpaří těkavé látky, veškerá voda a ve formě oxidů i další látky. Výsledným produktem je prakticky čistý uhlík s pórovitou strukturou o různé zrnitosti. Jednotlivé póry dosahují průměru až několika nanometrů, čímž se řádově zvýší aktivní povrch uhlí.<sup>7</sup> Běžně se lze setkat s hodnotami pohybujícími se okolo 300 m<sup>2</sup> aktivní plochy v jediném gramu, v průmyslu není výjimkou aktivní uhlí s povrchem až 5x vyšším, např. Chezcarb<sup>8</sup> od výrobce ORLEN Unipetrol.

## 2.1.2 Plynová chromatografie (GC)

Rozdílných fyzikálních vlastností těkavých organických látek lze využít k jejich separaci. Pro plynovou chromatografii jsou klíčové následující tři veličiny: polarita<sup>9</sup>, bod varu a tenze par. Nejprve se zavede vzorek do analytického systému, při kterém se přesný objem vzorku vstříkne do termoregulovaného „inletu“ (vstupního ventilu) chromatografu. Tento krok často zajišťuje autosampler, což je zařízení umožňující provádět nástřiky automaticky a přesněji. Následně je objem vzorku zahříván, aby došlo k úplnému přechodu do plynné fáze. Vzniklé výpary jsou unášeny proudem mobilní fáze do chromatografické kolony, kde dochází k separaci jednotlivých látek v čase za zvyšující se teploty. Na vnitřní stěnu kapiláry chromatografické kolony je nanášena vrstva sorbentu, jež interaguje s procházejícími molekulami, což způsobuje jejich zadržování. Na konci kolony přecházejí v čase rozdělené látky do detektoru, v tomto případě hmotnostního spektrometru.<sup>10</sup> [6]

---

<sup>7</sup> Odtud plyne název „aktivní uhlí“.

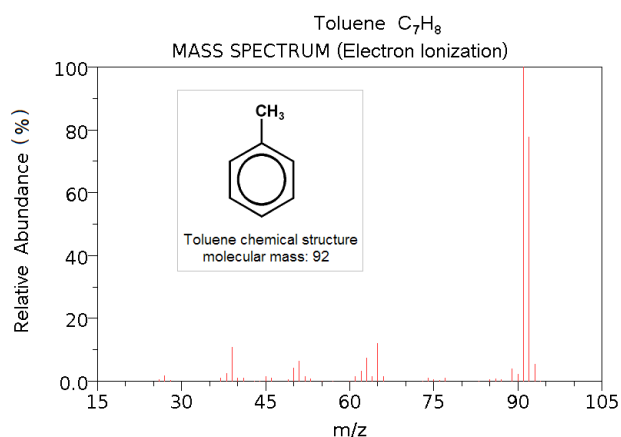
<sup>8</sup> <https://www.chezcarbcarbonblack.cz/>

<sup>9</sup> Polaritu lze definovat několika způsoby, nejčastěji pomocí dipólového momentu či PSA (polar surface area).

<sup>10</sup> <https://www.sciencedirect.com/topics/chemistry/high-resolution-gas-chromatography>

### 2.1.3 Hmotnostní spektrometrie (MS)

Hmotnostních analyzátorů i ionizačních technik existuje celá řada. V této práci bylo využito elektronového impaktu. Molekuly vcházející do spektrometru jsou ionizovány nárazem elektronu. Nejčastěji se používají elektrony o energii 70 eV či 12 eV. Nižší energie příchozího elektronu znamená nižší pravděpodobnost rozpadu molekuly po střetu, a v důsledku toho vyšší výtěžnost molekulového iontu. Při dostatečném hmotnostním rozlišení lze vypočítat sumární vzorec, což spolu s izotopickým profilem umožňuje ověřit identifikaci původní molekuly. [6] Vyšších energií při 70 eV se využívá k porovnání fragmentačního profilu se spektrálními knihovny, jako jsou například NIST či MassBank.



NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)



Obrázek 1: Hmotnostní spektrum toluenu

Obrázek 2: Kvadrupól

Pro účely práce byl využit analyzátor typu qTOF. Ten disponuje kvadrupólem, který prostřednictvím modulovaného napětí mezi čtyřmi nabitými elektrodami ovlivňuje průchod kationtů, či je filtruje dle podílu molekulové hmotnosti ku náboji. [6] Poté částice vstupují do kolizní cely, ve které zvolené ionty dále fragmentují, což umožňuje validaci jejich identifikace. Posledním krokem je detekce vysoko-rozlišovacím analyzátozem<sup>11</sup>, jehož princip spočívá v delší době letu těžších molekul. Na základě získaných hmotnostních spekter lze identifikovat analyzovanou látku, protože fragmentační profil je pro každou molekulu jedinečný.

<sup>11</sup> Odtud vysoko-rozlišovací hmotnostní spektrometrie, či HRMS (High-Resolution Mass Spectrometry).

## 2.2 Mikrosvět vzdušných částic

Aerosoly v ovzduší představují jedno z hlavních rizik pro zdraví dýchacích cest. Jde zpravidla o kapalnou či pevnou částici nepřevyšující 10 mikronů v průměru, jež se kvůli své nízké velikosti a hmotnosti dlouhodobě drží v atmosféře a zároveň jsou schopny dálkového přenosu vlivem jejího proudění.

Koncentraci prachových částic v ovzduší lze měřit několika technikami. Senzory zpravidla využívají měření kolmého rozptylu laserového paprsku pomocí fotorezistoru. Získaná vlnová funkce je poté přepočtena na velikost a četnost jednotlivých částic v každém skenu, zpravidla jednou za sekundu či rychleji. Tato metoda je limitována interpretací měření v počtu částic jednotlivých frakcí na  $\text{cm}^3$ , neposkytuje však informaci o chemickém složení a přesné hmotnostní koncentraci.<sup>12</sup> Tyto nedostatky lze kompenzovat současným zachycením měřeného aerosolu na filtry či kaskádové impaktory s následnou chemickou a fyzikální analýzou odebraných částic. Polétavý aerosol byl kontinuálně měřen rozptylem světla při frekvenci 1 záznam za vteřinu a zároveň zachycen na teflonových discích kaskádového impaktoru. V obou případech byly zachycovány a separovány frakce aerosolů s odlišnou velikostí částic.

### 2.2.1 Kaskádový impaktor

Pro zachyt jednotlivých aerosolových frakcí impaktor využívá postupně se zvyšující rychlost proudění vzorkovaného vzduchu vůči teflonovému disku, na který se při vyšší rychlosti zachytí menší částice. Impaktor je složen ze 4 pater s postupně se zužující štěrbinou nad teflonovým diskem. [7]



Obrázek 3: Kaskádový impaktor



Obrázek 4: Impaktor po demontáži

---

<sup>12</sup> Hmotnostní koncentrace není přímo měřena, ale pouze numericky interpolována na základě průměrné hmotnosti částic dané frakce



## 2.2.2 Skenovací elektronová mikroskopie (SEM)

Rozlišovací schopnost standardních optických mikroskopů končí přibližně na hranici mikronu. To je způsobeno povahou světla, respektive poměrně širokou vlnovou délkou fotonu ve viditelné oblasti spektra. Oproti tomu elektron je schopen dosáhnout vlnové délky až o čtyři řády kratší, díky čemuž umožňuje detekci obrazu s rozlišením desetin nanometru.

Elektronová mikroskopie má však svá omezení. Namísto optických čoček využívá elektromagnetických cívek, v dutině mikroskopu je nutné dosáhnout kvalitního vakua, neboť jinak by došlo k pohlcení elektronového paprsku molekulami vzduchu, a v neposlední řadě je nutné zajistit vodivost povrchu vzorku, jinak by nedocházelo k odrazu elektronů. [6]

Pro identifikaci prvků a provedení mapování byla využita energicky disperzní rentgenová spektroskopie, zkracovaná jako EDXS.

## 2.3 Elektronické senzory

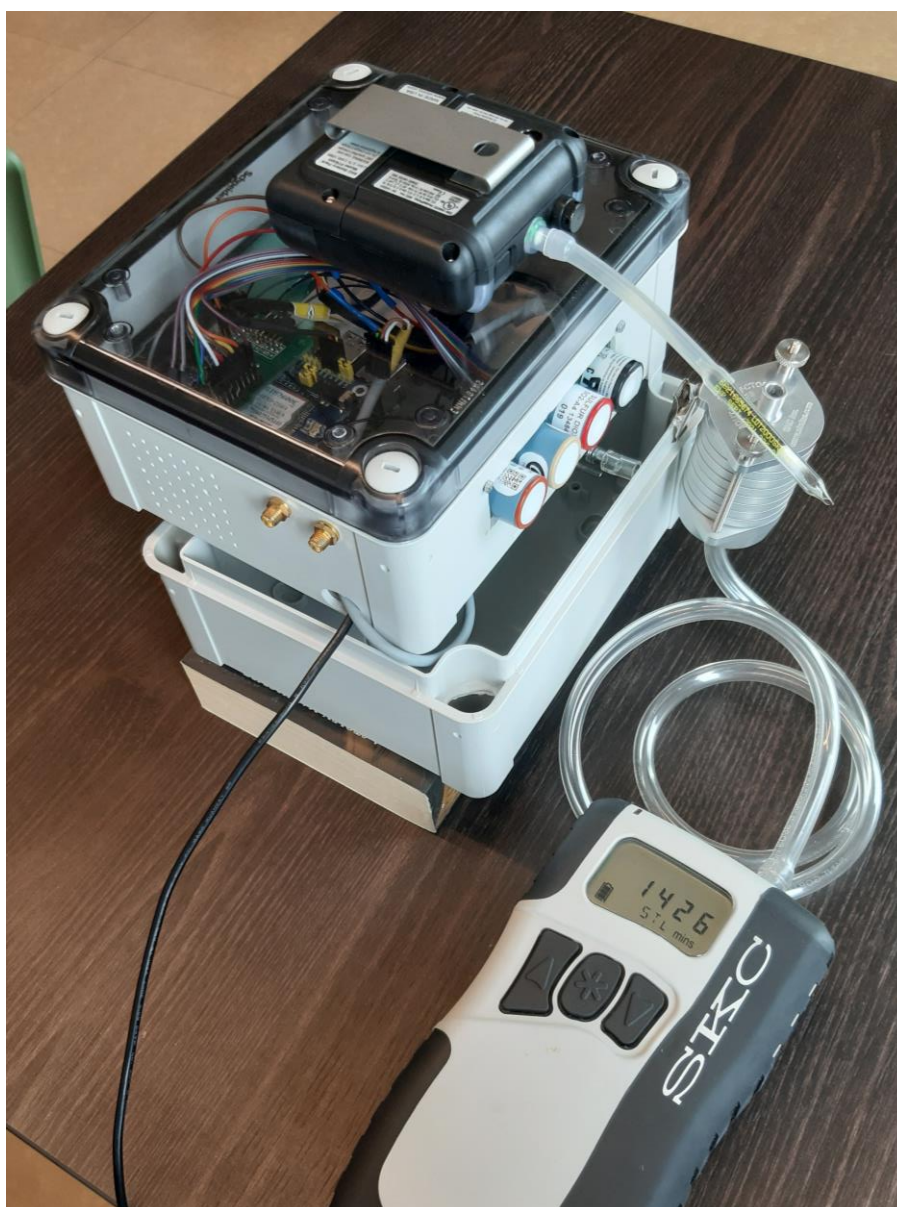
Hlavní motivací k použití senzorů byla jejich nenáročnost na aplikaci a s tím související cenová dostupnost. Mimo nízké ceny lze vyzdvihnout i nízkou hmotnost, a s tím související flexibilitu instalace. Tyto výhody jsou však kompenzovány omezenou citlivostí, selektivitou a semikvantifikací.

Data získaná ze senzorických měření mají jednu nespornou výhodu – jsou kontinuální a lze je vyhodnocovat v reálném čase, tzn. ihned po jejich naměření. Oproti tomu, je-li odebrán nějaký analyt standardní metodou, zpravidla se dozvíme jen informaci o tom, jaká byla celková koncentrace sledovaných látek ve vzorku odebraném na daném místě v určitém časovém rozmezí. V čem naopak senzorická data oproti standardním analytickým metodám zaostávají, je skutečnost, že nedokážeme přesně určit, o jaké konkrétní látky se jedná, natož jejich dílčí koncentrace. Avšak koncentrace základních anorganických látek lze již stanovovat s vysokou citlivostí i senzoricky. Nutno počítat s tím, že takovéto senzory se pohybují ve vysokých cenových hladinách.

Obecný elektronický senzor funguje na poměrně jednoduchém principu. Snímané fyzikální veličiny, popisující stav okolního prostředí senzoru, ovlivňují jeho vnitřní voltampérovou charakteristiku. V případě teplotního čidla roste se zvyšující se teplotou jeho elektrický odpor. Ten je možné měřit, zesilovat a převádět na definované signály, jež lze dále zpracovávat, a na jejichž základě lze utvořit model pozorované reality.

### 3 METODIKA

Byly provedeny dva odběry ovzduší – jeden venkovní, na střeše budovy CPTO (FŽP UJEP), a druhý vnitřní, ve frekventovaných prostorách pátého patra budovy. Oba vzorky byly odebrány po dobu 24 hodin. Pro multiparametrická měření bylo využito několika analytických technik. Adsorpce VOC na aktivní uhlí pro identifikaci GC-MS doplněná kontinuálním měřením fotoionizačním senzorem pro korelaci v čase. Aerosoly byly zachyceny kaskádovým impaktorem a kontinuálně sledovány senzorem rozptylu světla. Hodnoty fyzikálních parametrů a koncentrací vybraných anorganických plynů byly měřeny jen sensoricky.<sup>13</sup>



---

<sup>13</sup> Laicky řečeno, GC-MS umožňuje identifikovat přítomné těkavé látky, SEM umožňuje „fyzicky“ vidět pevné či kapalné částice a senzorka umožňuje sledovat vývoj jejich koncentrací v čase s vysokým rozlišením a dlouhodobě.

### 3.1 Použité senzory

Senzorika byla zvolena z toho důvodu, neboť poskytuje vysokou frekvenci sběru dat a je schopna detekovat krátkodobé výkyvy měřených parametrů, včetně jejich vynesení v příslušném čase. Při nízké pořizovací ceně poskytuje cenná data, s jejíž pomocí lze dotvářet obraz reality poskytovaný standardními analytickými metodami.

K měření byla vybrána následující kombinace senzorů, neboť poskytuje nejrelevantnější data. Byly použity senzory fyzikální, elektrochemické, optické (prachové) a fotoionizační. Elektrochemické senzory jsou kalibrovány na detekci specifických plynů určených výrobcem. Pro účely práce byly zvoleny senzory oxidů síry, oxidů dusíku a ozonu, neboť vyjmenované látky jsou typickým průvodcem znečištění způsobeného dopravou. [7] Vodivá spojení ozonového senzoru byla vlivem neopatrnosti během manipulace fyzicky poškozena. Data z něj získaná nelze pro jejich irelevantnost použít. Sensor amoniaku nakonec nebyl použit, neboť v tomto experimentu netvoří amoniak majoritní podíl polutantů. Nevýhodou těchto senzorů je skutečnost, že mohou být citlivé i na koncentrace jiných plynů, než k jejich měření jsou určeny. Jejich koncentrace-rozlišovací schopnost je na kvalitní úrovni.

Fotoionizační detektor umožňuje sledovat koncentraci těkavých organických látek v čase. Této skutečnosti bude využito k multiparametrickému monitoringu, neboť umožňuje korelovat data získaná metodou plynové chromatografie s hmotnostní spektrometrií a určit tak přesný čas emise těchto těkavých organických látek.

Senzor disperze světla, či také senzor prachových částic, lze obdobným způsobem využít ke korelaci dat získaných prostřednictvím skenovací elektronové mikroskopie. Očekáváme, že prach nebude v průběhu dne vířením homogenizován a že díky znalosti přesného času nárůstu jejich koncentrace dokážeme identifikovat jejich možný původ.

Nebyly vynechány ani senzory fyzikálních veličin. Výskyt jejich použití je v praxi velmi častý, neboť poskytují zajímavá data, s jejichž pomocí lze rozklíčovat mnoho užitečných informací. Motivací k jejich volbě je především kompletnost a neméně důležitá je i korelace s ostatními použitými senzory, aby bylo možné odhalit jejich případnou teplotní závislost, či závislost na tlaku a vlhkosti, což by mělo negativní vliv na relevanci měřených dat.

### 3.1.1 Fyzikální senzory

Pro měření fyzikální veličin (teplota, vlhkost, tlak) bylo využito senzoru DHT22. Ten lze na trhu pořídit za částku pohybující se okolo 200 Kč, cenou za to je však jeho nízká kvalita. Objevily se problémy s jeho omezeným rozsahem, který končí již při 15 °C a 20 % RH – nižší hodnoty již senzor nedokázal detekovat<sup>14</sup>, přestože výrobce uvádí rozsahy měření pro vlhkost 0-100 % RH a pro teplotu: -40 až +80 °C. Z těchto příčin bylo navrženo jej nahradit, protože byl zvolen senzor BME680, jež dle informací výrobce poskytuje výrazně lepší parametry.

Pro nově zvolený senzor bylo nutné nejprve napsat nový skript. Pro inspiraci jsem využil již existujících skriptů pro ostatní senzory. Kvůli mé nezkušenosti tento krok trval výrazně déle, tudíž se již z časových důvodů nepodařilo provést náhradní měření s novým senzorem. Do budoucna je ale v plánu jej využívat k dlouhodobým měřením.<sup>15</sup>



Obrázek 5: Senzor DHT22



Obrázek 6: Senzor BME680

Tabulka 1: Provozní parametry senzoru BME 680

Teplota:	-40 – 85	°C
Tlak:	300 – 1100	hPa
Vlhkost: <sup>16</sup>	0 – 100	%RH
Vstupní napětí:	1.2 – 3.6	V
Komunikační protokoly:	SPI nebo I <sup>2</sup> C	N/A

*Přesné technické specifikace senzoru jsou dostupné na stránkách výrobce.<sup>17</sup>*

<sup>14</sup> Příčina mohla být na straně softwaru.

<sup>15</sup> Měření probíhá bez větších přestávek již několik měsíců. Získaná data však pro absenci korelace se standardními analytickými metodami nemohou být pro účely práce využita.

<sup>16</sup> Nekondenzující vlhkost

<sup>17</sup> <https://www.bosch-senzortec.com/products/environmental-sensors/gas-sensors/bme680/>

### 3.1.2 Elektrochemické senzory

Elektrochemicky byly měřeny oxidy síry a oxidy dusíku. Byly zvoleny senzory NO<sub>2</sub>-A1 a SO<sub>2</sub>-A4 od výrobce Alphasense. Jedná se jedny z nejcitlivějších senzorů na trhu, umožňující detekci koncentrací plynů s rozlišením již v řádech ppb – částic na miliardu. Signál z těchto senzorů je digitalizován a zaznamenáván prostřednictvím protokolu SPI.



Obrázek 7: Ukázka elektrochemických senzorů od Alphasense

Tabulka 2: Provozní parametry senzoru VZ89TE

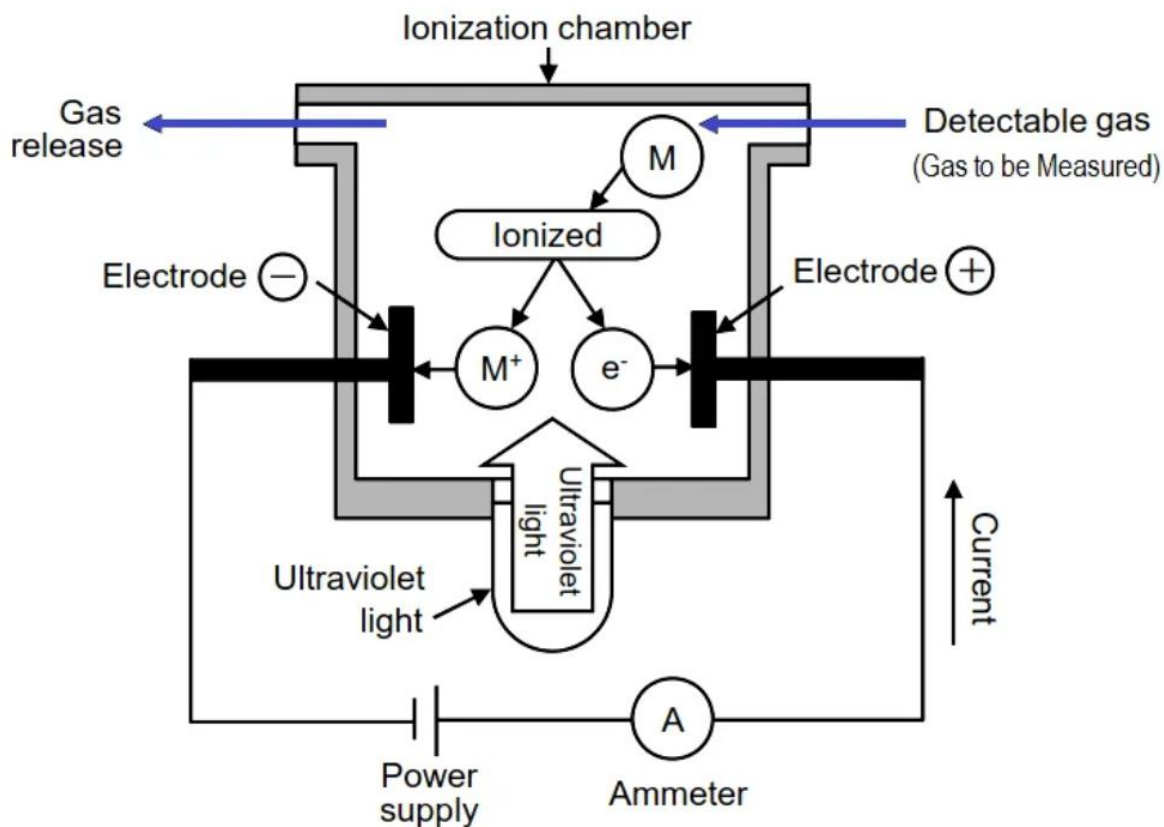
Vstupní napětí:	3.3	V
Provozní příkon:	125	mW
Doba náběhu:	15	min
Provozní teplota:	0 – 50	°C
Provozní vlhkost: <sup>18</sup>	0 – 95	%RH

---

<sup>18</sup> Nekondenzující vlhkost

### 3.1.3 Foto-ionizační detektor (PID)

Pro detekci těkavých organických látek byl využit senzor Alphasense PID-AH2 pro korelaci s GCMS identifikacemi. Princip detekce spočívá v ionizaci VOC energií 10,6 eV kryptonovou lampou. Nabité částice jsou pak detekovány jako celkový iontový tok, ten je převeden na analogový signál, který je následně digitalizován, dekodován, opatřen časovým razítkem, a nakonec zaznamenán do logovacího souboru.

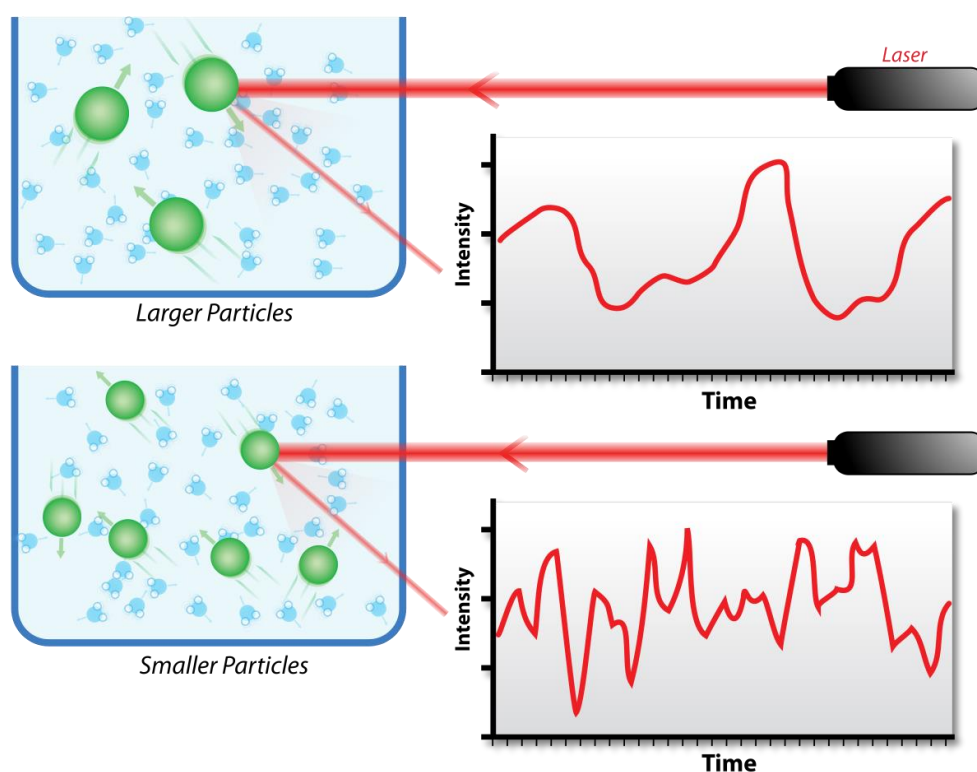


Obrázek 8: Schéma fyzikálního principu funkce fotoionizačního detektoru

### 3.1.4 Senzor rozptylu světla

Senzor aerosolů je založen na rozptylu laserového paprsku na částicích prosávaných měřící celou, signál je pak detekován fotorezistorem mimo osu procházejícího paprsku, opět digitalizován, zpracován a zaznamenán. Sensirion SPS30 byl zároveň použit ke korelaci dat ze SEM.

Senzor měří polétavé prachové částice ve složených frakcích v intervalech 0.3-10  $\mu\text{m}$ , 0.3-4.0  $\mu\text{m}$ , 0.3-1.0  $\mu\text{m}$  a 0.3-0.5  $\mu\text{m}$ . Senzor komunikuje prostřednictvím UART protokolu. Před zpracováním výstupních dat je nutné nejprve softwarově odseparovat jednotlivé frakce.



Obrázek 9: Schéma fyzikálního principu funkce senzoru rozptylu světla



## 3.2 Instalace senzorů

Důležitou součástí jakéhokoliv senzoru je datový list. Ten bývá dostupný na webových stránkách výrobce. Na pouzdře senzoru či na desce, na níž je osazen, jsou vyraženy alfanumerické identifikátory pro případy, kdy je potřeba senzor dohledat. Datový list obsahuje základní informace o principu funkce senzoru, uvádí výčet jeho parametrů, včetně jeho omezení a v neposlední řadě je jeho důležitou součástí instruktáž, jež s různou mírou detailu popisuje samotnou instalaci senzoru.

Nejprve je nutné senzor fyzicky připojit k mikropočítači prostřednictvím elektrických vodičů. Zpravidla existuje vícero způsobů, jak toho dosáhnout. Většina postupů využívá standardizovaných sběrnic, jež mají přesně definované počty vodičů, jejich účel a jejich napěťové hladiny. Ty je nutné dodržet, neboť jinak by mohlo dojít buď k chybám v komunikaci, nebo v horším případě, k nevratnému poškození některého ze zařízení.

Jakmile je senzor úspěšně fyzicky spojen s mikropočítačem, je nutné vytvořit skript, jež zajistí jejich vzájemnou komunikaci. Na elementární bázi je komunikace zprostředkována rozsáhlými kombinacemi logických jedniček a nul, které jsou fyzicky vysílané jako vysoké a nízké napěťové hladiny. Protože existuje nespočetné množství různých způsobů, jak tyto kombinace utvářet, byly zavedeny standardizované komunikační protokoly, jež práci významně usnadňují.

Na závěr je nutné soubory se získanými daty ve formě takřka nekončících řádků s čísly zpracovat do podoby, která umožní zachycenou realitu reprezentovat výstižněji a přehledněji. Tomu bude věnována poslední podkapitola.

Veškeré senzory včetně mikrokontroleru byly uloženy do plastové krabice s krytím IP68, pro možnost případného využití ve venkovních podmínkách.

### 3.2.1 Hardwarové řešení

Pro účely experimentu byl zvolen mikropočítač Raspberry Pi 4B+ (4 GB). Jeho hlavní výhodou je, že jeho součástí je plně funkční operační systém. Díky tomu lze vše naprogramovat prostřednictvím libovolného jazyka. Zároveň lze k mikropočítači snadno přistupovat vzdáleně, což se hodí především pro analýzu dat v reálném čase, případně ke kontrole sběrného zařízení, jež je umístěno na těžko přístupné pozici. Na trhu jsou dostupné moduly se SIM kartou, které umožňují zařízení použít v terénu. Nevýhodou zařízení oproti konkurenčním modelům je vyšší pořizovací cena a vyšší spotřeba elektrické energie, na což je třeba brát zřetel zejména v případě terénní aplikace.

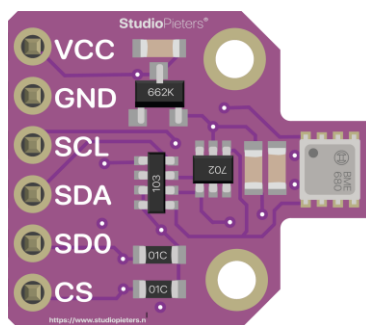


Raspberry Pi 4 Model B (J8 Header)					
GPIO#	NAME			GPIO#	
	3.3 VDC Power	1		2	5.0 VDC Power
<b>8</b>	GPIO 8 SDA1 (I2C)	3		4	5.0 VDC Power
<b>9</b>	GPIO 9 SCL1 (I2C)	5		6	Ground
<b>7</b>	GPIO 7 GPCLK0	7		8	GPIO 15 TxD (UART) <b>15</b>
	Ground	9		10	GPIO 16 RxD (UART) <b>16</b>
<b>0</b>	GPIO 0	11		12	GPIO 1 PCM_CLK/PWM0 <b>1</b>
<b>2</b>	GPIO 2	13		14	Ground
<b>3</b>	GPIO 3	15		16	GPIO 4 <b>4</b>
	3.3 VDC Power	17		18	GPIO 5 <b>5</b>
<b>12</b>	GPIO 12 MOSI (SPI)	19		20	Ground
<b>13</b>	GPIO 13 MISO (SPI)	21		22	GPIO 6 <b>6</b>
<b>14</b>	GPIO 14 SCLK (SPI)	23		24	GPIO 10 CE0 (SPI) <b>10</b>
	Ground	25		26	GPIO 11 CE1 (SPI) <b>11</b>
<b>30</b>	SDA0 (I2C ID EEPROM)	27		28	SCL0 (I2C ID EEPROM) <b>31</b>
<b>21</b>	GPIO 21 GPCLK1	29		30	Ground
<b>22</b>	GPIO 22 GPCLK2	31		32	GPIO 26 PWM0 <b>26</b>
<b>23</b>	GPIO 23 PWM1	33		34	Ground
<b>24</b>	GPIO 24 PCM_FS/PWM1	35		36	GPIO 27 <b>27</b>
<b>25</b>	GPIO 25	37		38	GPIO 28 PCM_DIN <b>28</b>
	Ground	39		40	GPIO 29 PCM_DOUT <b>29</b>

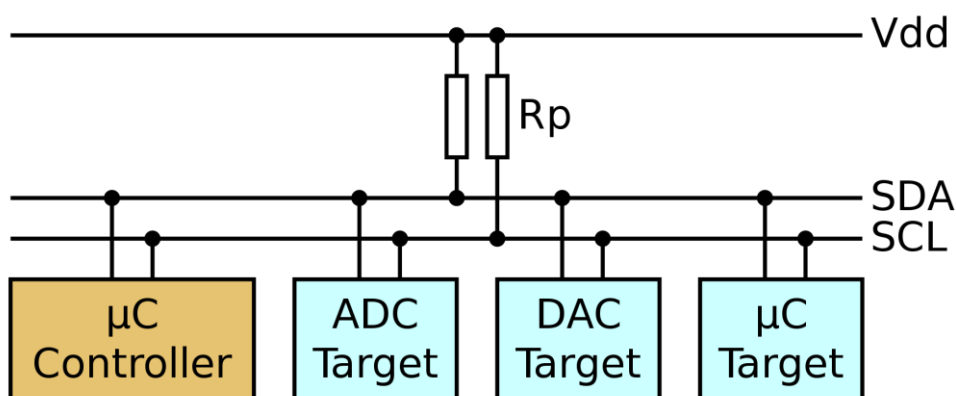
**Attention!** The GPIO pin numbering used in this diagram is intended for use with WiringPi / Pi4J. This pin numbering is not the raw Broadcom GPIO pin numbers.

<http://www.pi4j.com>

Obrázek 10: Rozložení a funkce vstupně-výstupních pinů na Raspberry Pi 4B+



Obrázek 11: Typické rozmístění pinů na senzoru



Obrázek 12: Příklad propojení zařízení užitím I<sup>2</sup>C sběrnice

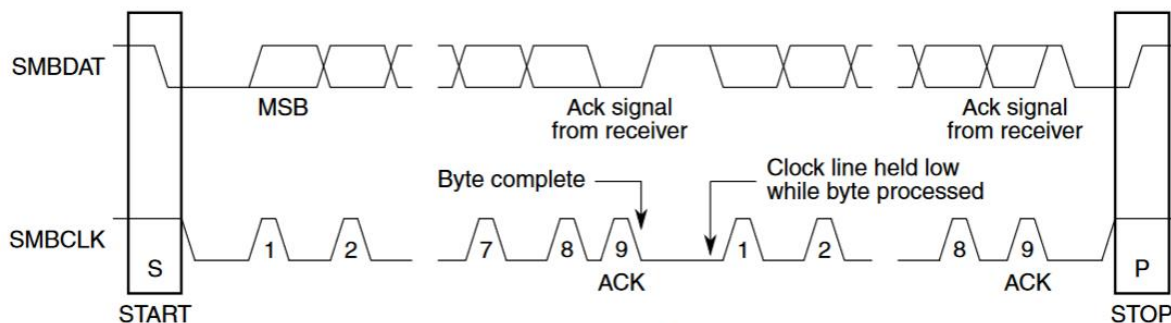
Každý z pinů zastává svou funkci. VCC slouží k připojení vstupního napětí, GND k připojení nulového vodiče, SDA je určena pro přenos dat a SCL zajišťuje synchronizaci časování. Na obrázku 5 chybí znázornění GND vodiče – v praxi je předpokládán automaticky. Senzor byl s mikroprocesorem propojen dle schématu znázorněného výše.

### 3.2.2 Softwarové řešení

Softwarové řešení musela být kompletní již daleko předtím, než bylo zahájeno vlastní zkoumání. Důvodem pro to je především skutečnost, že při námi zvolené frekvenci měření (1 záznam každou sekundu) narůstá objem dat závratným tempem. Z důvodu úspory úložiště potřebného k uložení dat a času k jejich zpracování je vhodné minimalizovat redundantní hodnoty. Ke zpracování takto obrovských objemů dat jsou běžně užívané tabulkové procesory naprosto nevhodné.<sup>19</sup> Byl využit Python. V neposlední řadě, během raných začátků práce ještě nebylo známo, zdali se mi podaří osvojit programovací jazyk natolik, abych jej byl schopen pro účely práce využít. Má zkušenost s programováním v té době nepřesahovala jeden rok.

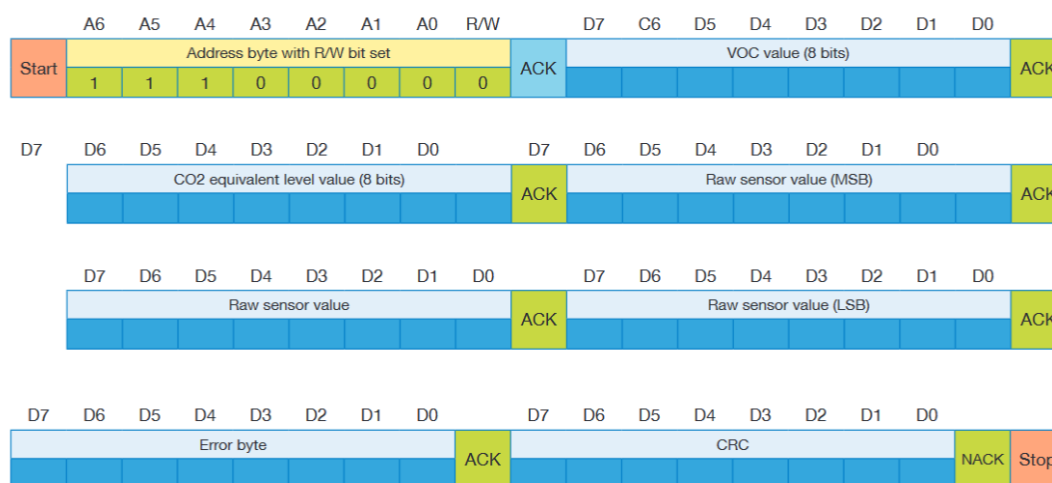
<sup>19</sup> Při vývoji tabulkových procesorů se jednoduše nepředpokládala nutnost operací s nadměrnými objemy dat

Poté, co jsou jednotlivá zařízení fyzicky propojena vodiči dle linkového schématu použitého komunikačního protokolu, je potřeba zajistit její komunikaci prostřednictvím softwaru. Přesný postup se často mění, neb závisí na použitém protokolu. Principiálně však zůstává obdobný, a proto je komunikace ilustrována na příkladu protokolu I<sup>2</sup>C přes sběrnici SMBus.



Source: *System Management Bus Specification, version 2.0, Figure 3-1*

Graf 1: Schéma přenosu dat prostřednictvím SMBus



Obrázek 13: Blokové schéma bytových sekvencí pro komunikaci se senzorem

3.5	0b000001100	getStatus	This command is used to read the VZ89TE status coded on 6x bytes + 1 CRC byte as follow: Byte-1 = VOC signal level value Byte-2 = CO2-equivalent signal level value Byte-3 = Raw sensor value MSB Byte-4 = Raw sensor value Byte-5 = Raw sensor value LSB Byte-6 = Error status byte Byte-7 = CRC
-----	-------------	-----------	--

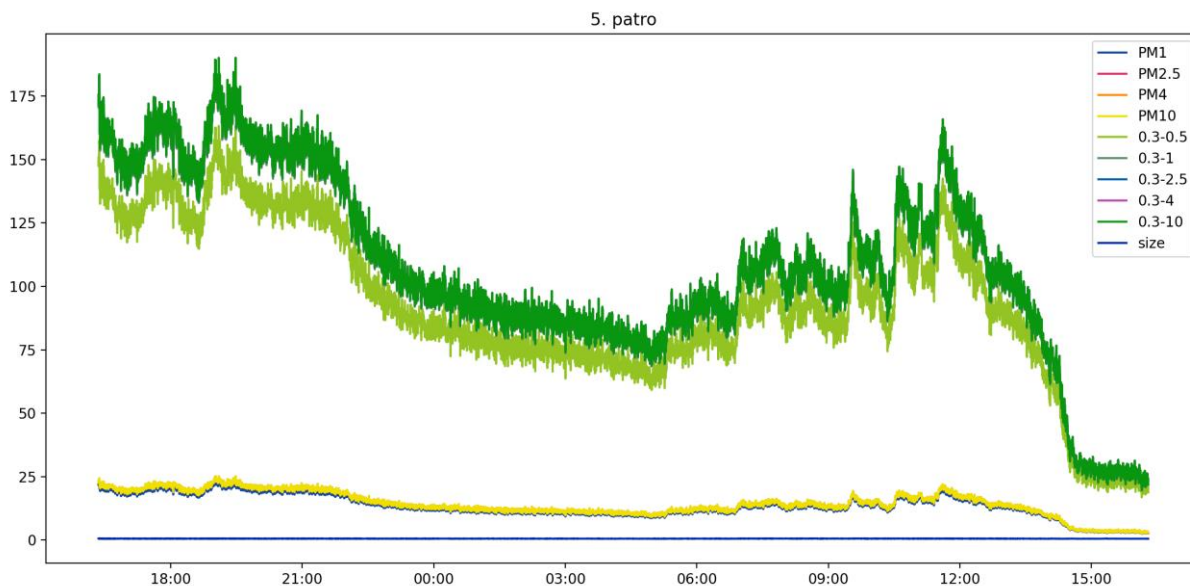
Obrázek 14: Výňatek z datového listu – sekvence pro čtení dat

### 3.2.3 Zpracování dat

Frekvence měření byla dohodnuta na 1 Hz<sup>20</sup>, tedy jeden záznam každou sekundu. Jednoduchým výpočtem lze dojít k hodnotě 86 400 záznamů za jediný den pro jeden parametr. Už to je na běžné poměry číslo vysoké. Nutno si uvědomit, že byla použita kombinace více senzorů, přičemž většina senzorů navíc odesílá hodnoty dvě – naměřenou a referenční. V konečném důsledku se tedy počet záznamů pohybuje řádově v nižších stovkách tisíců denně.

Vznikají tak dvě nepříjemné komplikace. Zaprvé je zde potřeba manipulovat s nadměrným objemem dat, s čímž si běžně dostupný software těžko poradí. Například programu MS Excel 2019<sup>21</sup> při naší zkušenosti činilo načíst balík dat značné obtíže, průběh práce komplikovala vysoká latence a vkládání formulí vedlo ke kolapsu programu. Zpracování dat prostřednictvím Excelu se stalo neuskutečnitelným. Existují mnohé komerčně dostupné softwary, jež byly speciálně vyvinuty právě pro práci objemnými daty. Pro příklad možno uvést Origin pro. Pro běžného studenta jsou z finančních důvodů bohužel nedostupné. Z těchto příčin byl použit programovací jazyk Python, spolu s volně dostupnými knihovnami Pandas a Matplotlib.

Protože konfigurace každé ze sad senzorů představuje odlišnou výzvu, byly pro ně sepsány oddělené programy. V případě senzorů plynů bylo potřeba odečíst referenční hodnoty a seskupit asynchronně přicházející data, v případě prachových senzorů bylo nutné softwarově oddělit (odečíst) jednotlivé frakce a sestavit pro ně individuální grafy. Z důvodu překryvu jednotlivých frakcí jsou za těchto podmínek vyobrazená data nepřehledná a nevypovídající.



Graf 2: Surová sensorická data bez provedení separace jednotlivých frakcí

<sup>20</sup> Nemusí být pravdivé v případě asynchronního logování.

<sup>21</sup> Verzi uvádím z toho důvodu, neboť existují náznaky, že výkon Excelu postupem verzí klesá. Více na odkaze: <https://peltiertech.com/poor-charting-performance-in-excel-2007/>

Druhá komplikace, kterou bylo nutné pro úspěšně zpracování sensorických dat eliminovat, představuje nutnost příchozí data logovat (zaznamenávat) asynchronním způsobem. Byť o pár odstavců výše stojí zmínka o tom, že záznamy provádíme s frekvencí 1 Hz, tedy jeden záznam každou vteřinu, jedná se pouze o aproximaci, neb skutečnost je složitější. Každý ze sensorů odesílá data v jiný čas a není možné tuto komunikaci synchronizovat. Kdyby to možné bylo, stejně se nelze vyhnout tomu, že je nutné data zapisovat postupně, což představuje riziko, že dojde-li k chybě či zpoždění na jediném ze sensorů, hrozí zastavení celého programu. Nejprůvětivější řešení nabízí již zmíněné asynchronní logování, kdy se příchozí hodnoty zaznamenají právě ve chvíli, kdy je mikroprocesor obdrží, a to v libovolném pořadí.

Nyní k popisu samotného programu. V jeho hlavičce je (pod „importy“ veškerých knihoven) nastaveno jméno vstupního souboru, název grafu a jméno výstupního souboru. Tyto hodnoty je možné podle potřeby přepsat, čehož lze využít ke zpracování jiných datových sad programem. To byla ostatně jedna z dalších závažných motivací k sepsání programu, neboť v případě klasických tabulkových procesorů by bylo nutné potřebné kroky provádět ručně a pro každý nový vstup od znova, případně makrem, jehož použití přivádí též svá úskalí. V programu nechybí ani možnost vložit parametr pro oříznutí dat, ať už ze začátku či z konce. To se hodí především v případech, kdy při počáteční a koncové manipulaci s měřicím zařízením často způsobujeme deviaci koncových dat. Navíc senzory fyzikálních veličin mají od výrobce definovanou 20minutovou „rozehřívací“ dobu, kdy senzor teprve nabíhá, a neposkytuje proto validní data.

Po úspěšném definování vstupní parametrů programu následuje načtení hodnot ze zvolených CSV souborů do paměti programu. Pro načtení dat a následnou manipulaci s nimi byla zvolena speciální datová struktura zvaná „dataframe“ [dataframe], již poskytuje knihovna Pandas. Z dataframe jsou nejprve odfiltrovány sloupce/řádky s přebytečnými hodnotami a následně je sloupec s datem a časem převeden na strojově-zpracovatelný formát.

Jak již bylo zmíněno, v případě asynchronního logování jsou hodnoty všech druhů sensorů promíchány do hromady – proto je nutné je před dalším zpracováním nejprve zase seřadit. A k tomu slouží kód vyobrazený na následující straně.<sup>22</sup>

---

<sup>22</sup> Zde dlužím tiskaři omluvu za černé pozadí - bohužel se mi nepodařilo změnit, aniž bych narušil schéma barev.

```

62 #-----
63 """    SEPARATE SENSOR DATAFRAMES    """
64 #-----
65 sensorTypes = df['sensor'].unique().tolist()
66 sensorFrames = {}
67
68 for sensor in sensorTypes:
69     dfSensor = df[df['sensor'] == sensor]
70     dfSensor = dfSensor.reset_index(drop=True)
71     dfSensor = dfSensor.drop(columns='sensor')
72
73     if sensor != "humidity_temp":
74         dfSensor = dfSensor.rename(columns={'value': sensor})
75         dfSensor = dfSensor.drop(columns='hum')
76         sensorFrames[sensor] = dfSensor
77         del dfSensor
78
79     else:
80         ''' "humidity_temp" PROCESSING'''
81         dfSensor = dfSensor.rename(columns={'value': 'temp'})
82
83         ## Odd values filter
84         dfSensor = dfSensor[dfSensor['hum'] <= 100]
85         # dfSensor = dfSensor[dfSensor['temp'] >= 0]
86         dfSensor = dfSensor[dfSensor['temp'] >= 15]
87
88         ## Separate humiTemp into TWO dataframes
89         dfTemp = dfSensor.drop(columns='hum')
90         dfHum = dfSensor.drop(columns='temp')
91         sensorFrames['temp'] = dfTemp
92         sensorFrames['hum'] = dfHum
93         del dfTemp, dfHum

```

Obrázek 15: Ukázka kódu zodpovědného za třídění dat dle druhu senzoru

Následně už stačí jen dataframy se standardními a referenčními hodnotami jednoduše odečíst. Původně vzestaly obavy ze složitosti kódu, jež by ke každé standardní hodnotě dohledával později příchozí hodnotu referenční. V případě práce v tabulkovém editoru by tento úkol byl takřka neřešitelný. Nakonec ale právě tabulkové editory podnítily inspiraci k zajímavému řešení, které celou práci výrazně zjednodušilo. Stačilo předpokládat, že standardních hodnot je stejné množství jako referenčních. V tuto chvíli, kdy máme jednotlivé hodnoty oddělené od sebe do samostatných dataframů, lze příslušné dataframy metaforicky „postavit“ vedle sebe a každou standardní hodnotu a příslušnou hodnotu referenční jednoduše řádek po řádku odečíst.

Pro úplnost jen doplním popis funkce vnořené části programu. V této fázi dochází k „ořezávání“ koncových hodnot na základě parametrů definovaných v hlavičce. Dále je vytvořen slovník<sup>23</sup> pro lepší práci s jednotkami měřených veličin a v neposlední řadě jeden slovník sloužící k definování barev příslušných grafů.

<sup>23</sup> Zde termín slovník označuje speciální datovou strukturu, v informatice je více známá jako „hashovací tabulka“.

V závěru jsou pak veškeré dataframes se zpracovanými hodnotami vykresleny do jim příslušícímu oknu v grafu, okna jsou tvořena automaticky na základě počtu použitých senzorů. Výhodou tohoto řešení je skutečnost, že vytvořený program lze snadno uzpůsobit v případě, kdy by byly zvoleny nové senzory. Díky tomu je měřící jednotka snadno modifikovatelná. Jednotlivým veličinám jsou poté přiřazeny přednastavené barvy pro lepší vizuální aspekt a přehlednost, dále jsou nastaveny další parametry grafu, ale jejich podrobnosti zde nebudou rozebírány, protože nejsou podstatné pro účely práce.

Na samotném konci programu je graf vyexportován do souboru s požadovanou příponou, kvalitou a názvem pro jeho další použití v budoucnu (například k přiložení do středoškolské odborné práce), a následně je figura se všemi dílčími grafy vykreslena na obrazovku.

Ke zpracování dat ze senzorů prachových částic je využíváno principiálně totožného kódu. Namísto odcítání referenčních hodnot je ale nutné oddělit jednotlivé frakce prachových částic.

```

167 #-----
168 """    NEW DATAFRAME - w/ DISMANTLED VALUES    """
169 #-----
170 dfSeparate = df.copy()
171 dfSeparate['0.3-10'] = dfSeparate['0.3-10'] - dfSeparate['0.3-4']
172 dfSeparate['0.3-4'] = dfSeparate['0.3-4'] - dfSeparate['0.3-2.5']
173 dfSeparate['0.3-2.5'] = dfSeparate['0.3-2.5'] - dfSeparate['0.3-1']
174 dfSeparate['0.3-1'] = dfSeparate['0.3-1'] - dfSeparate['0.3-0.5']
175 dfSeparate['0.3-0.5'] = dfSeparate['0.3-0.5'] - 0
176 dfSeparate['PM10'] = dfSeparate['PM10'] - dfSeparate['PM4']
177 dfSeparate['PM4'] = dfSeparate['PM4'] - dfSeparate['PM2.5']
178 dfSeparate['PM2.5'] = dfSeparate['PM2.5'] - dfSeparate['PM1']
179 dfSeparate['PM1'] = dfSeparate['PM1'] - 0
180
181 ## Tidying up
182 oldNames = ['0.3-0.5', '0.3-1', '0.3-2.5', '0.3-4', '0.3-10', 'size']
183 newNames = ['0.5', '1.0', '2.5', '4.0', '10', 'size']
184 renamDict = {}
185
186 for old, new in zip(oldNames, newNames):
187     renamDict.update({old:new})
188
189 dfSeparate = dfSeparate.rename(columns=renamDict)
190

```

Obrázek 16: Ukázka kódu, jež zabezpečuje odečet frakcí



### 3.3 Odběr těkavých látek

Pro účely odběru vzorku bylo jako sorbentu využito karbonizované kokosové vlákno Anasorb CSC od výrobce SKC a odběr probíhal opět na dvou místech – na střeše CPTO a uvnitř v pátém patře. Aby odebrané vzorky byly relevantní a vzájemně porovnatelné, je nutné, aby byl objem vzduchu prosátý při jednotlivých odběrech neměnný. Toho lze nejlépe dosáhnout užitím kalibrovaných pump s konstantním průtokem. Konkrétně byla použita pumpa SKC Touch. Konstantní průtok byl nastaven na 50 ml/min<sup>24</sup>, odběr byl prováděn po dobu 24 hod. Celkem bylo při každém odběru prosáto 72 litrů vzduchu.



Obrázek 17: Sorpční trubičky Anasorb CSC



Obrázek 18: Kalibrovaná pumpa SKC Touch

Po 24 hodinách byl odběr ukončen (prostřednictvím vestavěného časovače), následně byl uhlíkový sorbent plynotěsně uzavřen a transportován do laboratoře. Ke kvantitativnímu převedení do vialky bylo zapotřebí odříznou skleněné hrdlo trubice pomocí diamantového nože a pak prostrčením drátu sorbent z ampule „vyštouchnout“. Protože jsou látky zachycené na povrchu uhlíku nedostupné k přímému GC-MS měření, je potřeba VOC nejprve uvolnit do rozpouštědla. V našem případě byl použit sirouhlík, neboť dosahuje jedné z nejvyšších výtěžností extrakce VOC z aktivního uhlí [3] a zároveň vychází brzy z chromatografu.

K přesnému odměření 2 ml byla použita Hamiltonova stříkačka. Sirouhlík je nervový jed. Z toho důvod bylo nutné celý postup provádět v digestoři a pod odborným dohledem, bez ohledu na to, s jak malým množstvím bylo manipulováno. Uhlíkový sorbent byl ponechán macerovat v sirouhlíku po dobu 30 minut a průběžně byl vzorek protřepáván, pro maximalizaci výtěžnosti extrakce. Před nástřikem do chromatografu byl vzorek nechán odstát za účelem sedimentace obsaženého aktivního uhlí – přítomnost pevných částic uhlíku v roztoku by totiž téměř jistě zanesla úzké kapiláry ve stroji, jejichž výměna představuje finanční i časovou zátěž.

---

<sup>24</sup> Hodnota doporučována výrobcem.



### 3.4 Identifikace těkavých organických látek

Pro identifikace VOC byl využit plynový chromatograf (Agilent 7890B) s hmotnostním detektorem (Agilent 7250 qTOF). Do chromatografu byly automaticky dávkovány 3  $\mu\text{l}$  sirouhlíkového extraktu při teplotě pece 50 °C držené po dobu 5 minut. Dále bylo vytápěno gradientem 5 °C/min na 300 °C držených 1 minutu. Látky vycházející z kolony (HP-5) byly detekovány v rozsahu 30 - 800 Da při skenovací frekvenci 5 Hz. Celková doba měření činila 56 minut a bylo identifikováno 19 hlavních látek. Před identifikací bylo odečteno pozadí sirouhlíku. Hmotnostní spektra detekovaných píků byla extrahována a porovnána s knihovnou NIST s ověřením sumárních vzorců.

### 3.5 Analýza prachových částic

Spolu s těkavými organickými látkami byly odebírány i prachové částice pomocí impaktoru. Po 24hodinovém měření byl odběr ukončen. Pumpa s impaktorem byla bezpečně přenesena do SEM laboratoře, aby se zabránilo případné desorpci látek, což by vedlo ke znehodnocení vzorku.

K záchytu aerosolů bylo využito kaskádového impaktoru Sioutas, který byl v čistém prostředí laboratoře vybaven teflonovými disky k záchytu jednotlivých frakcí a transportován na odběrový bod spolu s ostatním analytickým vybavením. Prosávání atmosféry bylo zajištěno pumpou Leland Legacy s konstantním průtokem 9 L/min s nastaveným 24h časovačem.

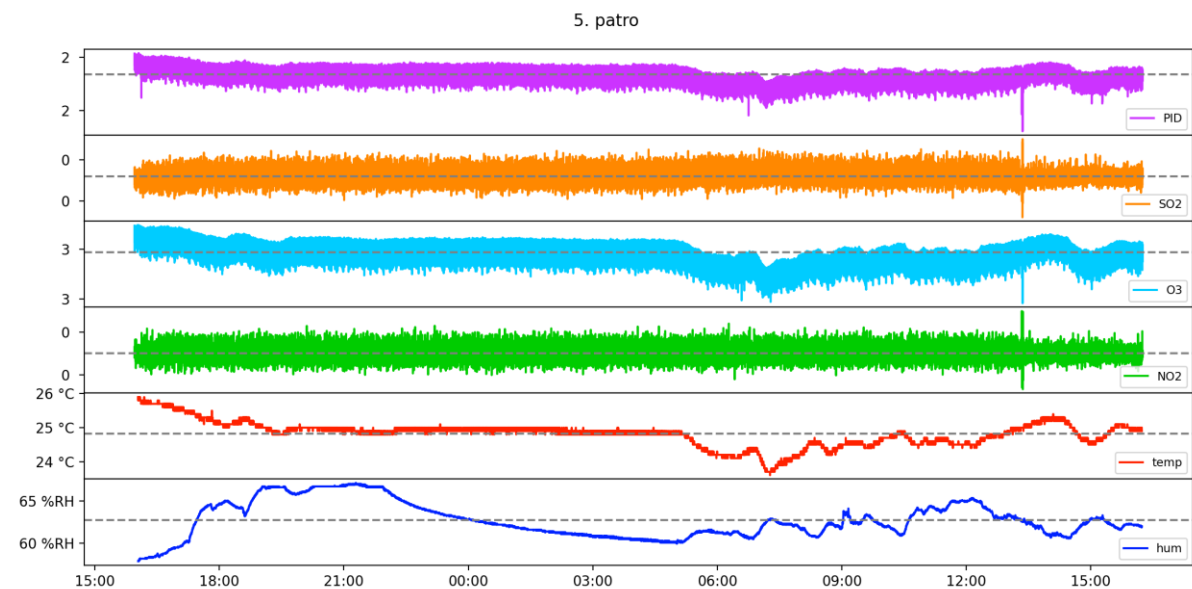
V jednotlivých kaskádách impaktoru lze rozlišit následujících pět frakcí prachových částic: 5.0-2.5  $\mu\text{m}$ , 2.5-1.0  $\mu\text{m}$ , 1.0-0.5  $\mu\text{m}$ , 0.5-0.25  $\mu\text{m}$ , 0.25-0.10  $\mu\text{m}$ .

Vzorky z dílčích pater kaskádového impaktoru byly přeneseny na oboustrannou uhlíkovou pásku, a následně pozlaceny pro zvýšení elektrické vodivosti. Válečky s nanesenými vzorky byly vloženy do měřicí komory a po evakuaci skenovány svazkem elektronů o energii 15 eV. Protože se ale přenést vzorek na uhlíkovou pásku se dařilo pouze částečně, kvůli čemuž byl vzorek značně znehodnocen, bylo později rozhodnuto skenovat teflonové membrány napřímo. Vzhledem ke komplexnosti vzorku byla kvalifikovaným odhadem vybrána reprezentativní oblast pro záznam ve vysokém rozlišení a provedení prvkového mapování.

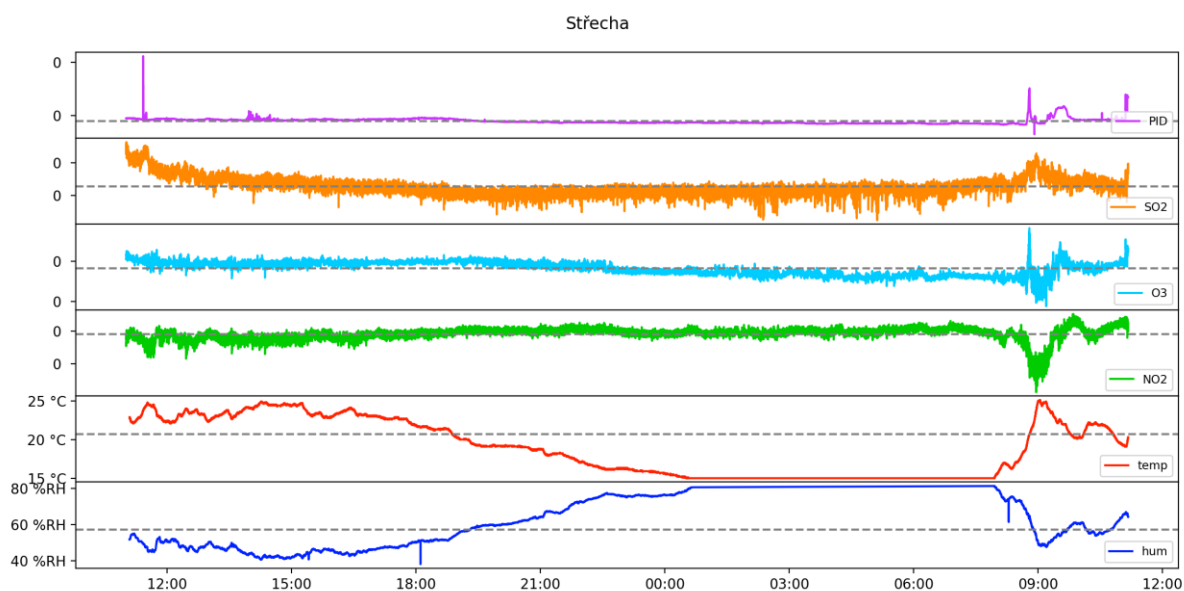
## 4 VÝSLEDKY

### 4.1 Senzorická měření

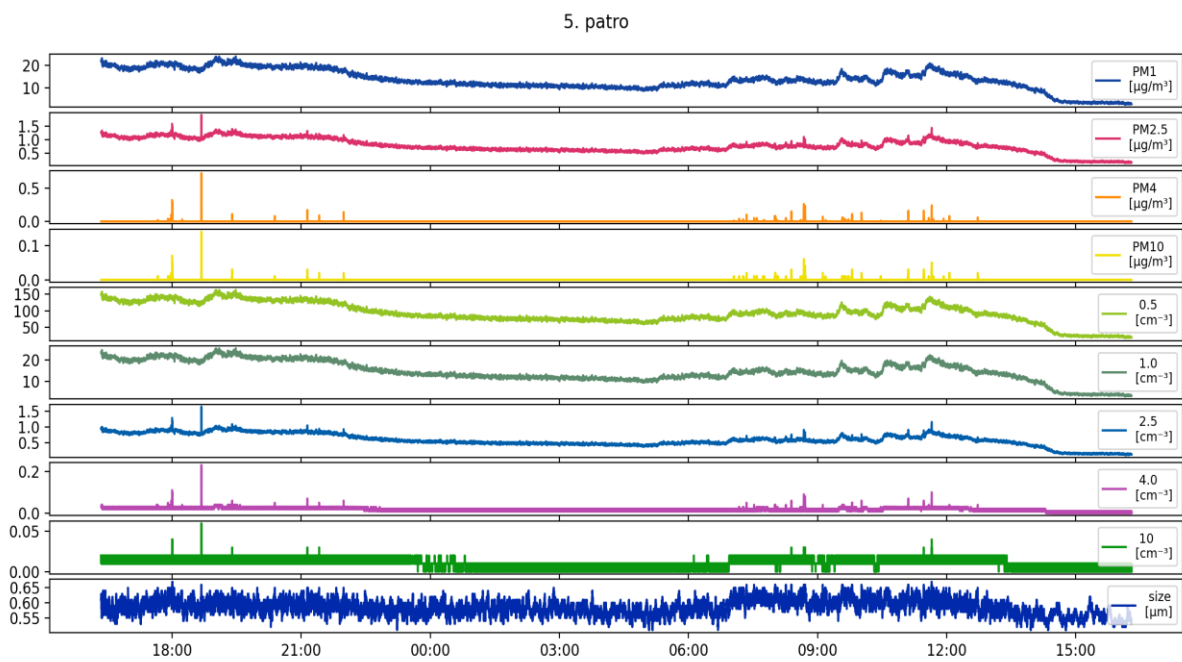
Z důvodu korupce dat musely být hodnoty z prvních tří hodin měření oříznuty, pro kompenzaci jsme nechali zařízení běžet o tři hodiny déle.



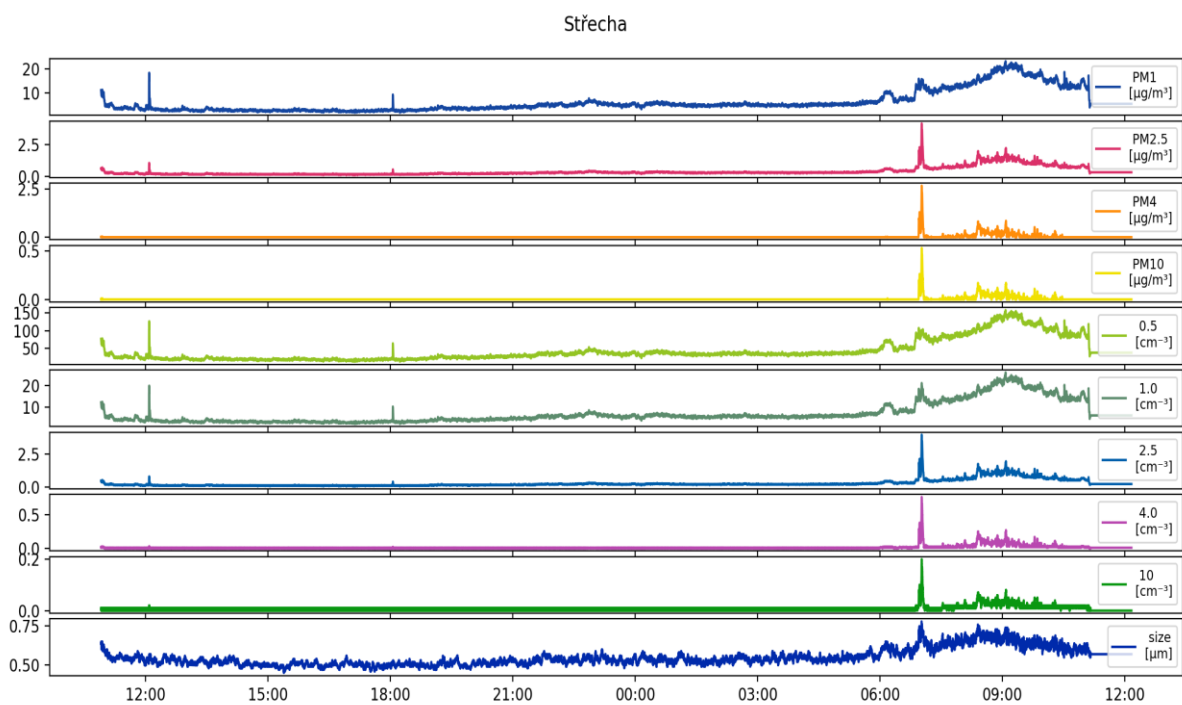
Graf 3: Zpracovaný záznam senzorického měření chemických látek v 5. patře CPTO.



Graf 4: Zpracovaný záznam senzorického měření chemických látek na střeše CPTO.



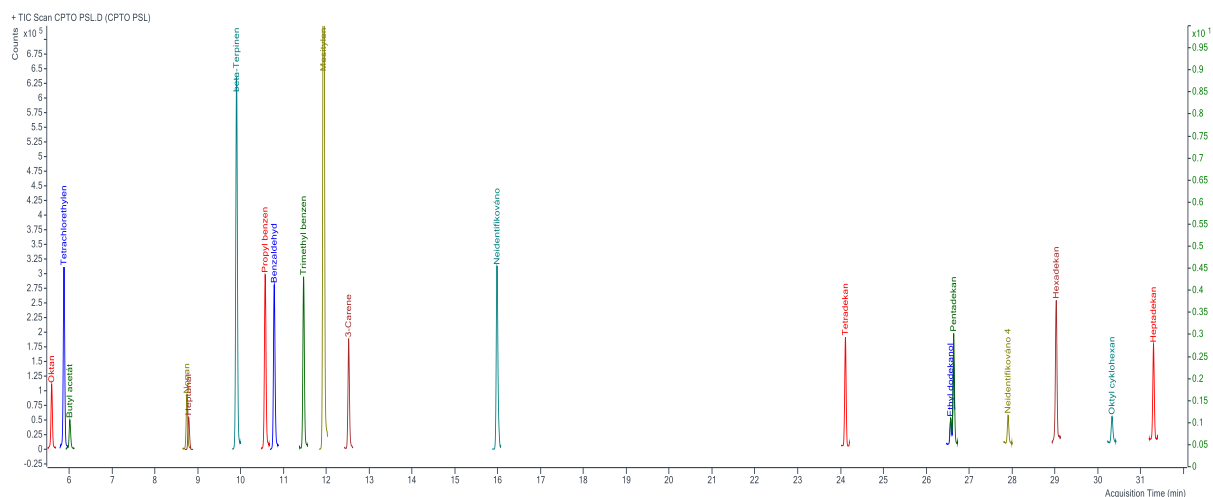
Graf 5: Zpracovaný záznam senzoričkého měření prachových částic v 5. patře CPTO.



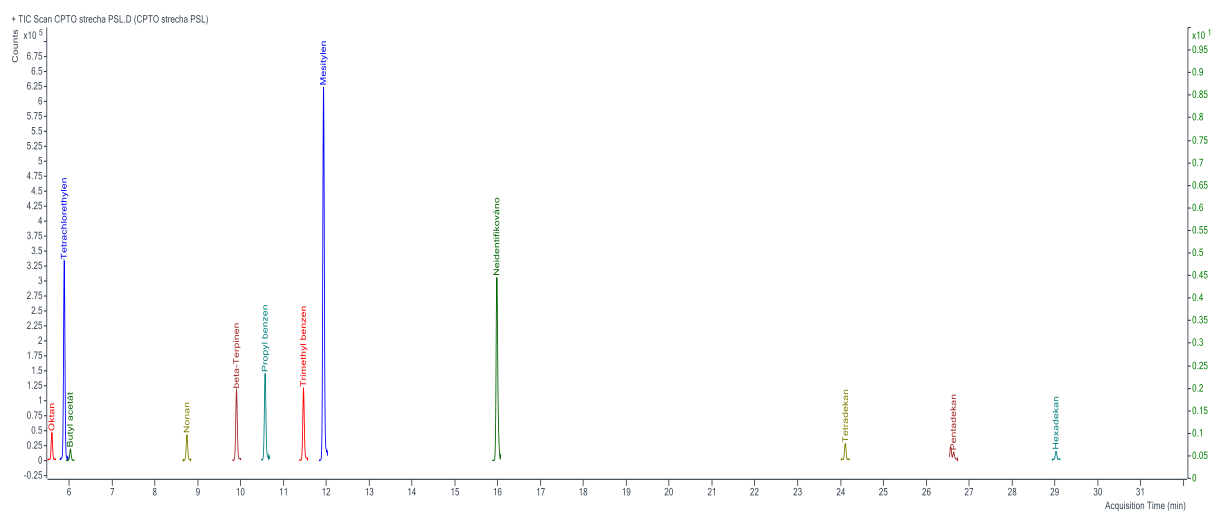
Graf 6: Zpracovaný záznam senzoričkého měření prachových částic na střeše CPTO.

## 4.2 Těkavé organické látky

Analýzou pomocí GCMS se nám podařilo identifikovat následující skupiny látek: alkany, alkoholy, aldehydy, mono-aromatické sloučeniny a terpeny. Mezi analyty se objevil i chlorovaný derivát.


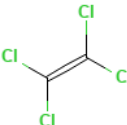
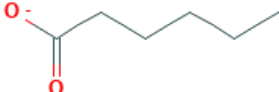

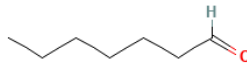
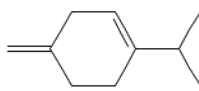
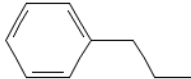
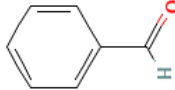
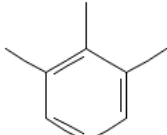


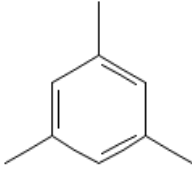
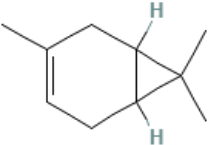

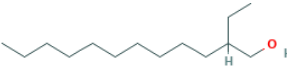


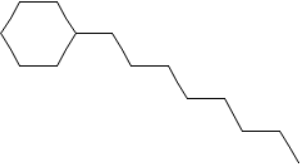

Graf 7: Píky látek identifikovaných z odběru provedeném v 5. patře CPTO.



Graf 8: Píky látek identifikovaných z odběru provedeném na střeše CPTO.

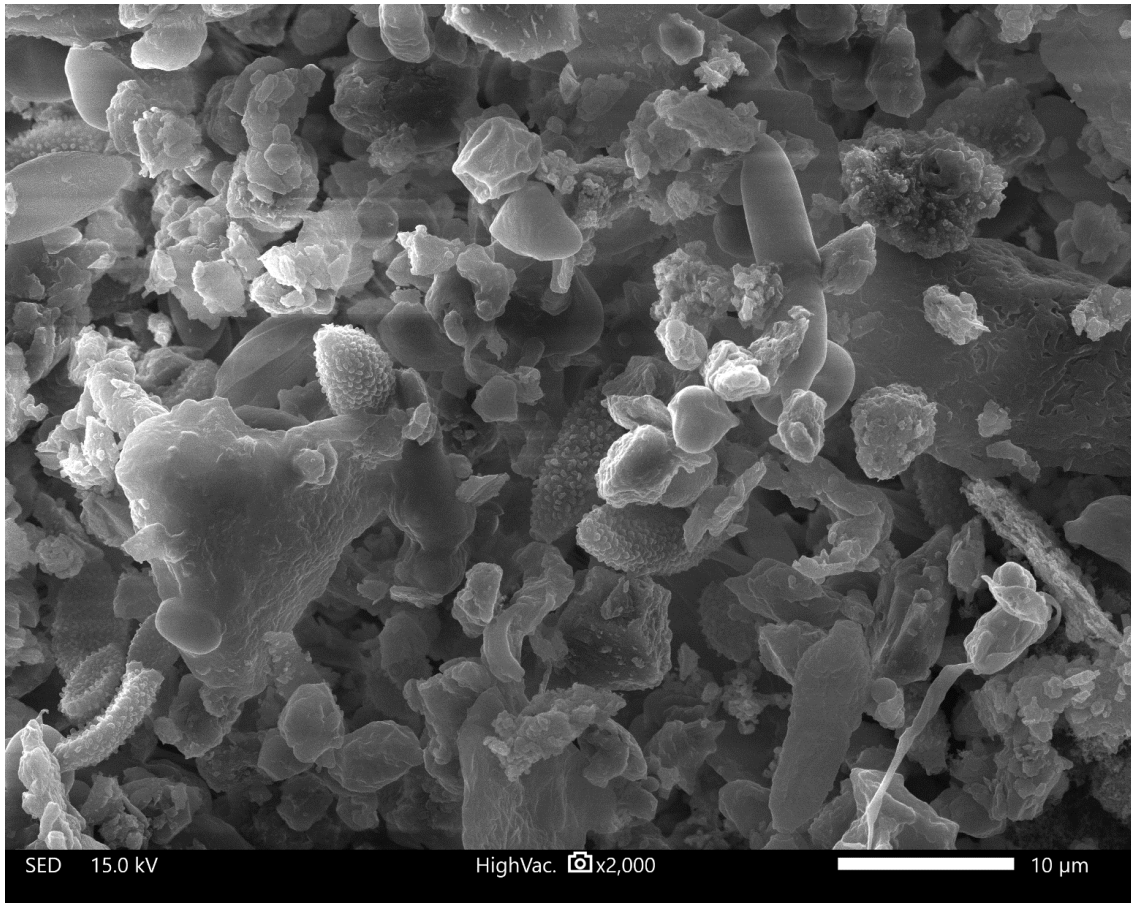
Tabulka 3: Identifikované těkavé organické látky

Strukturní vzorec	Empirický vzorec	Systematický název	Retenční čas [min]
	$C_8H_{18}$	Oktan	5.53
	$C_2Cl_4$	Tetrachlorethylen	5.88
	$C_6H_{12}O_2$	Butylacetát	6.02
	$C_9H_{20}$	Nonan	8.75
	$C_7H_{14}O$	Heptanal	8.79
	$C_{10}H_{16}$	$\beta$ -terpinen	9.91
	$C_9H_{12}$	Propylbenzen	10.58
	$C_7H_6O$	Benzaldehyd	11.37
	$C_9H_{12}$	Trimethylbenzen	11.47

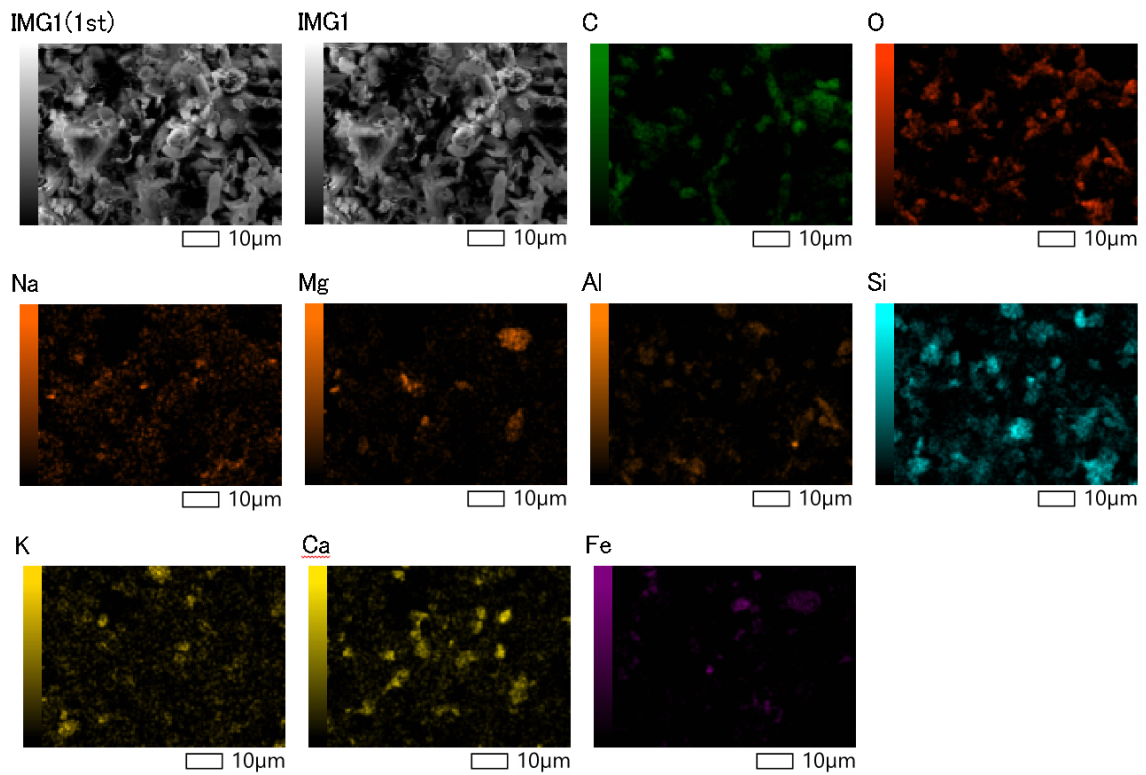
	$C_9H_{12}$	Mesitylen	11.93
	$C_{10}H_{16}$	3-caren	12.52
	$C_{14}H_{30}$	Tetradekan	24.11
	$C_{14}H_{30}O$	Ethyl dodekanol	26.27
	$C_{15}H_{32}$	Pentadekan	26.64
	$C_{16}H_{34}$	Hexadekan	29.03
	$C_{14}H_{28}$	Oktylcyklohexan	30.33
	$C_{17}H_{36}$	Heptadekan	31.30

### 4.3 Snímky z elektronového mikroskopu

Dále jsou uvedeny snímky z jednotlivých pater kaskádového impaktoru s barevným vyznačením distribuce prvků. Na snímcích si lze mimo jiné všimnout nápadných vodorovných světlých linií. Ty jsou způsobeny vysokou energií elektronovému paprsku, jež způsobuje pohyb a degradaci vzorku během skenování.

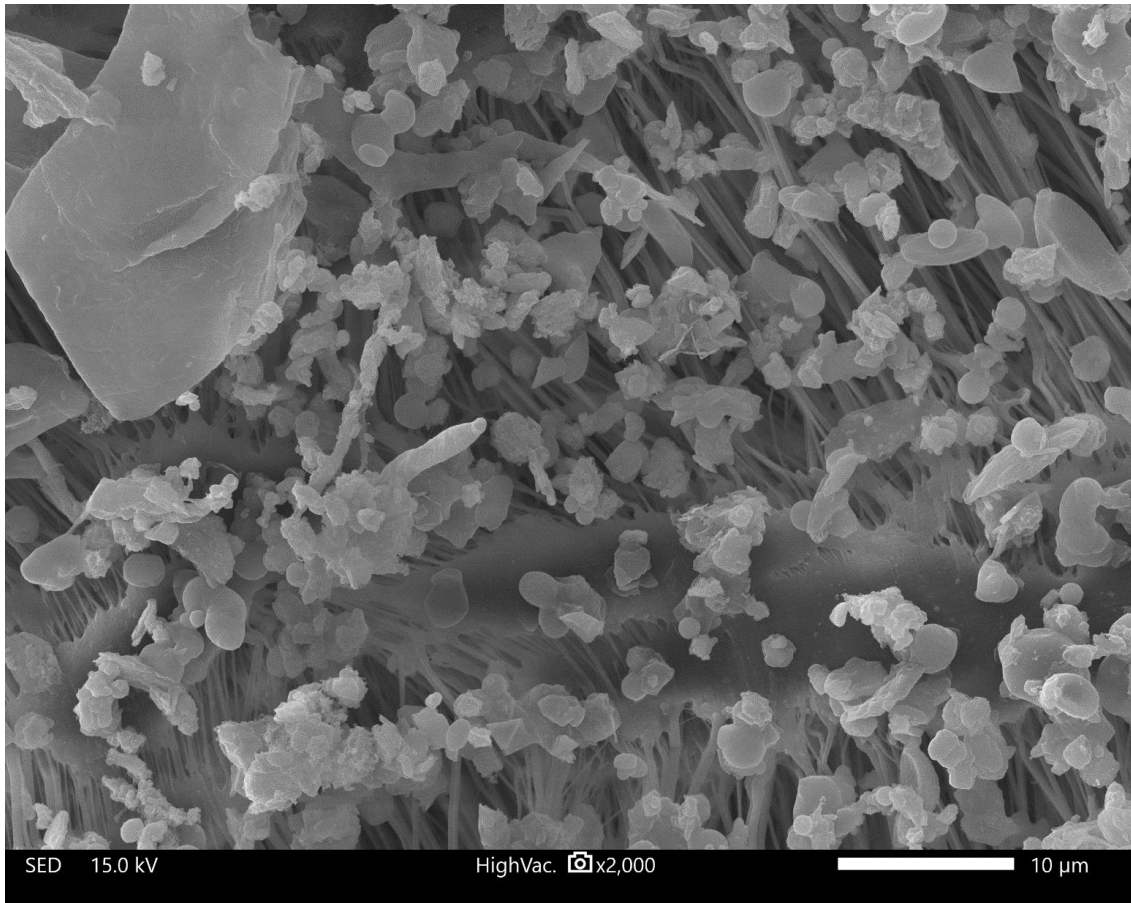


Obrázek 19: SEM frakce PM2.5

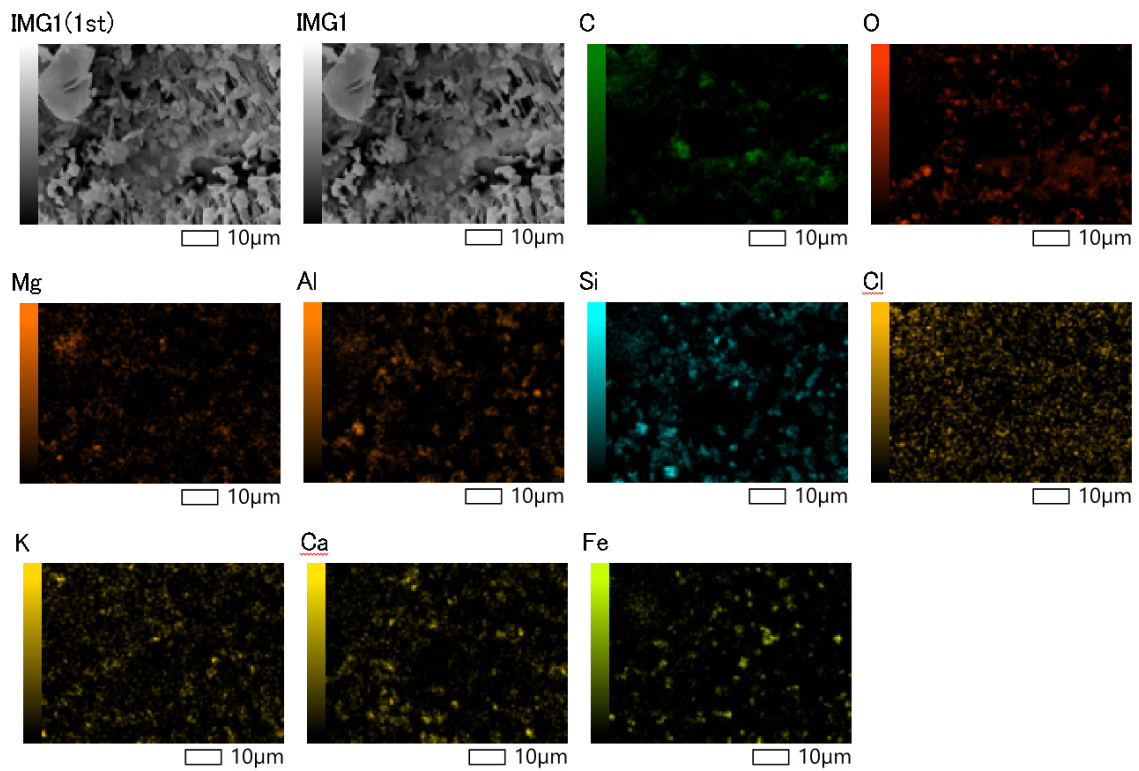


Obrázek 20: Prvkové mapování frakce PM2.5



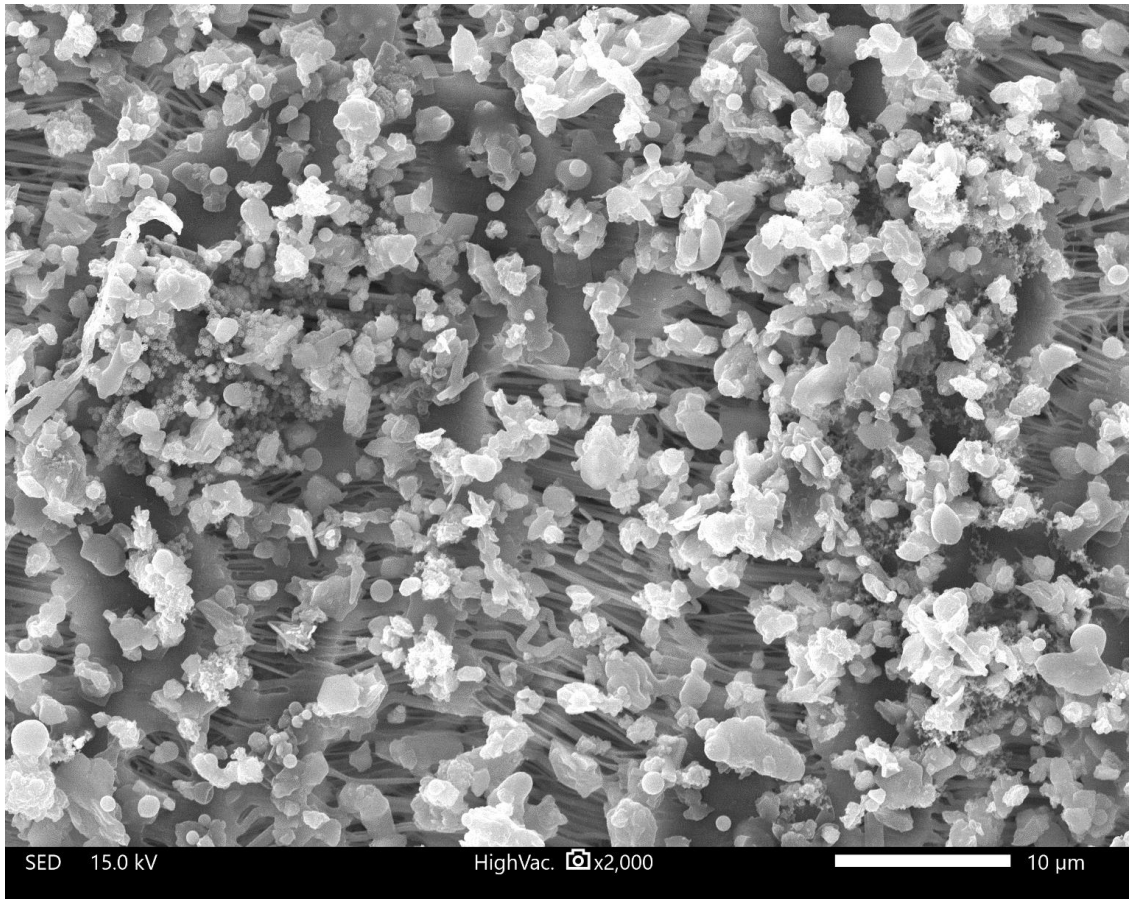


Obrázek 21: SEM frakce PM1.0

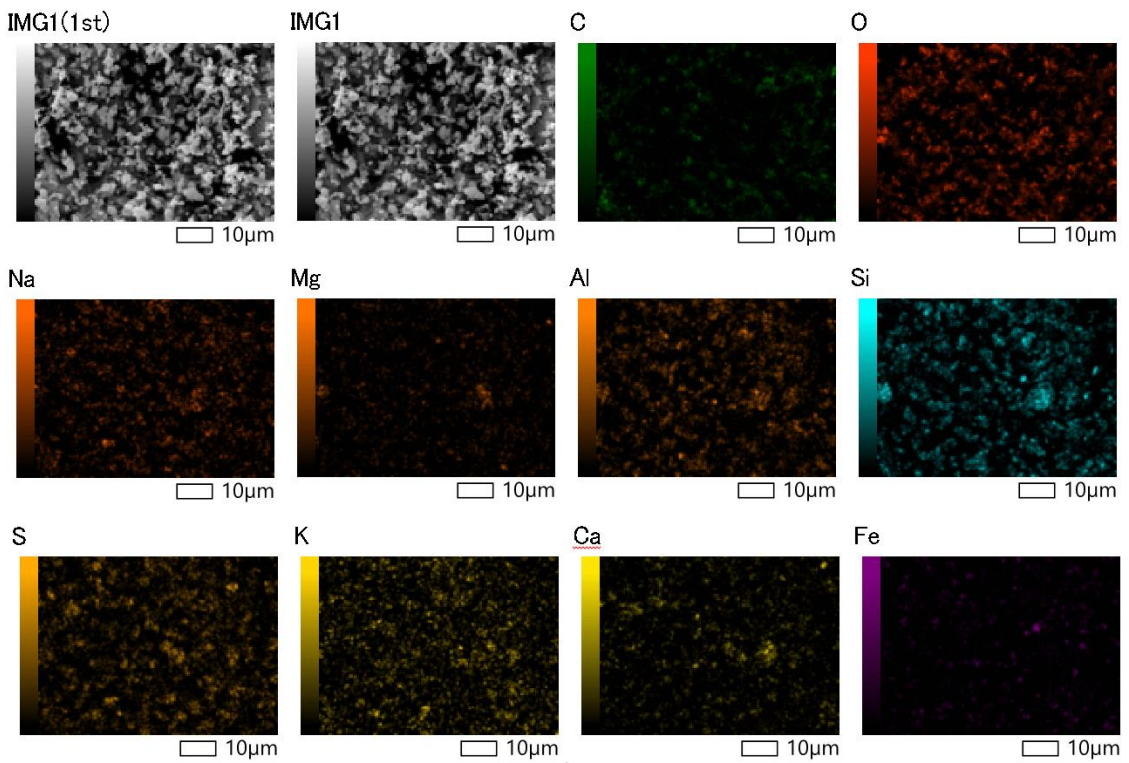


Obrázek 22: Prvkové mapování frakce PM1.0

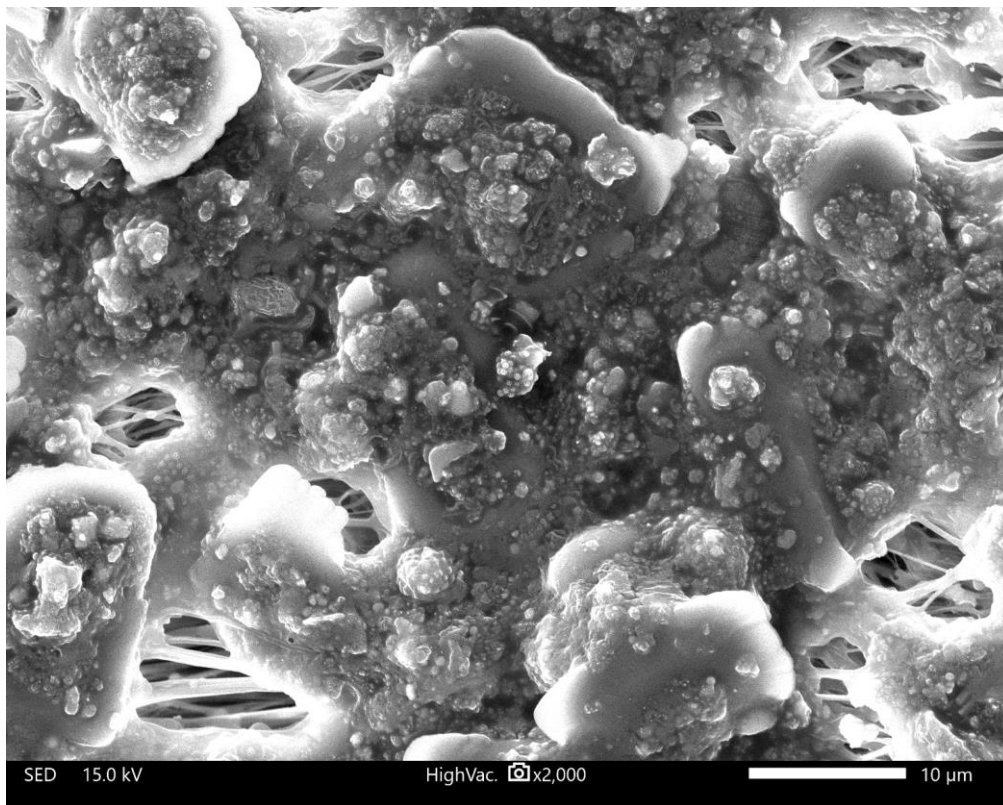




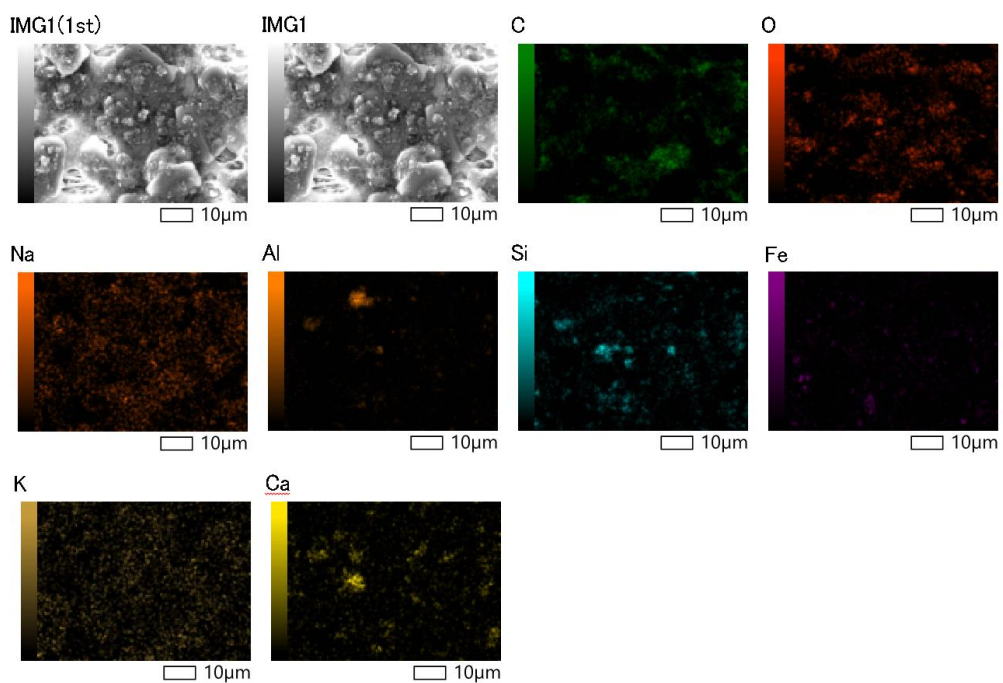
Obrázek 23: SEM frakce PM0.50



Obrázek 24: Prvkové mapování frakce PM0.50



Obrázek 25: SEM frakce PM0.25



Obrázek 26: Prvkové mapování frakce PM0.25

## 5 INTERPRETACE DAT

Na grafech ze sensorického měření lze pozorovat nárůst znečišťujících látek (plynů a prachu) především v brzkých ranních hodinách a několik nárůstů se objevuje i v hodinách odpoledních. Původ těchto výkyvů lze téměř jistě přisuzovat dopravě během špiček. Lze pozorovat i pozvolný pokles vlhkosti v CPTO během noci. Důvodem pro to je nepřítomnost lidí, a tedy zdrojů vlhkosti, jako jsou pocení a dýchání. Mimo to je patrný pozvolný pokles teploty.

Srovnáme-li podobu dat v grafech ze sensorických měření, lze si v případě vnitřního měření všimnout výrazných „pruhů“ šumu. Důvodem je skutečnost, že ve vnitřních prostorách je koncentrace těchto plynů výrazně nižší, protože [prostory] nejsou přímo vystaveny produktům nedokonalého spalování. Sensor tak měří víceméně konstantní hodnoty na hranici jeho rozlišovací schopnosti, výsledkem čehož je křivka, tvarem prakticky totožná s přímkou. Při vykreslování grafů jsou všechny křivky přizpůsobeny tak, aby optimálně vyplnily prostor okna. Vlivem těchto procesů dochází k deformaci křivek. Ve venkovním prostředí je již koncentrace analytů násobně vyšší, a proto není deformace tak zratelná.

Zaměříme-li se potom (v grafu ze sensorického měření vnitřních prostor) přímo na podobu křivek jednotlivých veličin, koncentrace oxidů síry a oxidů dusíku je reprezentována přímkou. Oproti tomu v případě ozonu a fotoionizačního detektoru, je už průběh funkce zajímavější - nelze si nevšimnout výrazné podobnosti v jejich tvarech. Obdobný tvar lze i sledovat u grafu teploty, což naznačuje korelaci těchto veličin. To se dalo očekávat, neboť teplota látky přímo souvisí s její kinetickou energií, a ta zas silně souvisí s její aktivitou. Jinými slovy, s rostoucí teplotou se látka jeví jako více aktivní, byť její koncentrace je stále stejná.<sup>25</sup> Odečteme-li od měřených veličin vliv teploty, získáme křivku ve tvaru přímky, jako v případě oxidů síry a dusíku. Důvodem je opět nízká koncentrace analytů ve vnitřních prostorách.

Při venkovním měření narazil sensor fyzikálních veličin DHT22 na své hranice, přestože v technických parametrech byly definovány meze širší. Důvodem pro to mohla být špatná konfigurace na straně komunikace či softwaru. Pro sensor byla již zvolena a otestována adekvátní náhrada (přesněji se jedná o sensor BME680), jak již bylo uvedeno v metodice.

K interpretaci dat (z venkovních měření) je nutné dbát zvýšené pozornosti. Výchyly jednotlivých hodnot, obzvláště fyzikálních parametrů jako je teplota a vlhkost, jsou výrazně vyšší, než je tomu u vnitřního měření. Budova poskytuje určitou „homeostázi“, zatímco venku může vzduch volně proudit. Následkem toho mají výsledná data výrazně proměnlivější charakter. Avšak protože koncentrace analytů je ve venkovních prostorách násobně vyšší než v prostorách vnitřních, z důvodů již popsaných výše, teplotní závislost sensorů se projevuje již jen minimálně, a lze ji proto zcela zanedbat.

---

<sup>25</sup> Tuto skutečnost lze lépe ilustrovat na příkladu vody, kdy při standardní (pokojové) teplotě je takřka neškodná, zatímco při teplotách přibližujících se bodu varu může vysoká aktivita vody vést k až silným popáleninám.



Projdeme-li grafy jednotlivých senzorů, setkáme se s již povědomými trendy. Fotoionizační ukazuje jeden ostrý pík ve dvanáct hodin ranních, poté obecně zvýšenou koncentraci těkavých organických látek v dopoledních hodinách, a zvláště znatelné jsou pak dva píky okolo osmé a dvanácté hodiny ranní. V případě senzoru oxidů síry lze vidět v odpoledních hodinách pozvolný pokles koncentrací, a následně jejich ustálení na stabilní hodnotě během noci. S ranní dopravou tato koncentrace opět stoupá, během dopoledne mírně klesá a v poledne opět dosahuje maxima. Průběh koncentrace přízemního ozonu je obdobný. Příčinu zdánlivého poklesu koncentrace oxidů dusíku od základní linie lze nejpravděpodobněji přisoudit přítomnosti interferujících plynů tlumících odezvu. Toto je v principu zásadním nedostatkem senzorického měření oxidů dusíku. V tomto případě poskytuje ČHMÚ pravdivější údaje.

Data ze senzorů prachových částic poskytují jednoznačná data. V případě vnitřního měření si lze všimnout, jak se jemný prach (PM<sub>1.0</sub>) rozvířený během dne pozvolna usazuje poté, co poslední zaměstnanci opustí CPTO před jeho zavírací dobou v deset hodin. Následující den ráno se kolem páté hodiny začne prach zase mírně vířit a další nárůst zvířeného prachu se dostavuje kolem sedmé hodiny, kdy do CPTO zavítá většina jeho zaměstnanců. Prach je nejvíce rozvířen během dopoledne, kdy jsou vnitřní prostory nejvíce vytíženy frekventovaným pohybem, mezi dvanáctou a patnáctou hodinou prach zase postupně ustává. Dovolím si ještě zdůraznit, že při pohledu na jednotlivé frakce dokážeme rozlišit, že většinový podíl prachu připadá nejmenším částicím frakce PM<sub>1.0</sub>.

Na venkovních datech pak lze poukázat dominantní vrchol mezi šestou a dvanáctou ranní hodinou, který je s nejvyšší pravděpodobností důsledkem frekventované dopravy a všeobecně zvýšeného ruchu ve městě v dopoledních hodinách. Dále se v grafu vyskytují tři jehlovité píky – jeden přesně ve dvanáct hodin, jeden v šest hodin odpoledních a jeden v sedm hodin ranních. První dva budou pravděpodobně způsobeny zvýšenou dopravou. Třetí z píků je nápadně vysoký – to lze přisoudit tomu, že z práce lidé odjíždění pozvolna, a proto se zvířený prach rozloží v průběhu odpoledne, zatímco na sedmou hodinu ranní jezdí do práce valná většina lidí, a emise prachu se poté kumulují v krátkém časovém rozsahu.

Nyní k samotné spektrometrické analýze. Na chromatogramu lze vidět poměrně širokou škálu uhlovodíků. Většinou se jedná o těkavé složky pohonných hmot – kratší uhlovodíky pochází z benzínu, ty delší pak z nafty. Kyslíkaté deriváty mají původ pravděpodobně v parfémach z čistících prostředků, používaných především při úklidu budovy. Přítomnost chlorovaného derivátu nejprve vzbudila podezření na nežádoucí únik z některého z blízkých chemických závodů, po další rešerši se však ukázalo, že tetrachlorethen se používá k suchému čištění textilu a mastných povrchů.

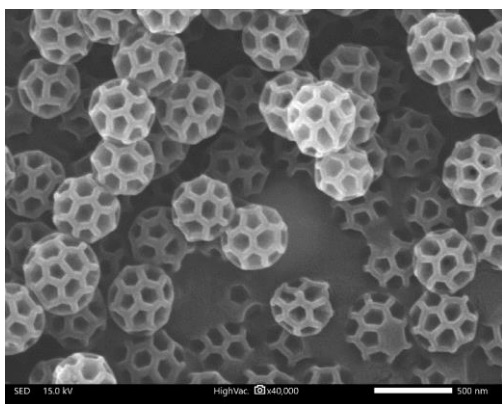
V tabulce si lze všimnout strukturně složitějších sloučenin, jako je například oktylcyklohexan. Ty jsou produktem nedokonalého spalování. Dlouhé molekuly se v průběhu hoření postupně štěpí, a je-li přístup kyslíku hoření dostatečný, pak je výsledným produktem pouze oxid uhličitý a vodní pára. V opačném případě, kdy není ke kompletnímu spálení dostatek času, dochází k úniku tzv. radikálů, jež spolu vzájemně reagují a vytváří tak složitější celky. Aromatické sloučeniny vznikají rekombinací nízkomolekulárních radikálů obdobným způsobem.

Snímky z elektronového mikroskopu nám umožňují nahlédnout (a to doslova) do mikrosvěta<sup>26</sup> částic, jejichž měřením se celá tato práce zabývala. Prachové částice, ať už anorganického či organického původu, mohou kvůli své velikosti působit stejně dráždivým účinky, jako tomu bylo v případě těkavých látek. Díky prvkovému mapování dokážeme blíže určit jejich původ.

Nejhrubší částice nacházíme ve vzorku frakce PM2.5, na které docházelo k sorpci částic s průměrem 2.5 mikronu a vyšším. S povážením vyobrazeného měřítka lze povážít průměrnou velikost těchto částic jako přibližnou 10 mikronům. Teflonová membrána v tomto patře zachytila největší množství prachu, což je patrné již z její uhlově černého zbarvení. Důvodem je skutečnost, že frakce částic se skládají, podobně jako v případě senzoru rozptylu světla.<sup>27</sup> Na snímcích lze pozorovat oválně protáhlé částice s nápadně členitým povrchem. S největší pravděpodobností se jedná o částice přírodního původu, jako jsou pylová zrna, bakterie či řasy. Prvkové mapování v těchto oblastech vykazuje vysokou koncentraci uhlíku a kyslíku. Velké úlomky s kamenitou strukturou představují patrně vzdušný písek, což koresponduje se zvýšeným množstvím oxidů křemíku v těchto oblastech.

Nepřirozeně dokonalé hladké částice kulového tvaru byly nalezeny ve frakci PM1.0. Prvkové mapování ukazuje, že tyto částice jsou tvořeny různými kovy. Vznikají při úniku tavenin do vzduchu a jejich následné kondenzaci.

Ve frakci PM0.50 byly nalezeny podivné shluky struktur, které svým tvarem připomínaly míčky. Vzhledem k jejich velikosti (přibližně 500 nm) bylo složité odhadnout jejich původ.



Obrázek 27: Detailní SEM snímek frakce PM0.50

Obrázek 28: Křísek polní - *Psammotettix alienus*

S pomocí pana Ing. Daniela Bůžka Ph.D. z FŽP se je nakonec podařilo identifikovat. Jedná se o brochosomy, což jsou hydrofobní částice produkované hmyzem řádu polokřídlých za účelem jejich ochrany před deštěm a predátory.

---

<sup>26</sup> Vzhledem k rozlišení SEM by bylo vhodnější označení „nanosvět“, avšak tento pojem není tak široce rozšířen.

<sup>27</sup> Lépe to lze demonstrovat na příkladu síta s postupně se snižující hrubostí. Nejhrubším sítem projdou takřka všechny částice, zatímco na následujících sítích se postupně zachycují. Nejjemnější částice projdou všemi patry.

## 6 DISKUSE

Při interpretaci grafů jsme došli k závěru, že senzorická měření anorganických plynů ve vnitřních prostorách postrádají opodstatnění. Důvodem je skutečnost, že venkovní polutanty se dovnitř dostávají obtížně, a responsivita proto není okamžitá, látky v omezeném objemu vzduchu uvnitř budovy snadno difundují, což opět zplošťuje píky, a v neposlední řadě koncentrace těchto látek je na hranici detekovatelnosti senzory. Přesto považujeme za více než vhodné v měření těchto polutantů pokračovat, jen za využití vhodnější metody. Navrhujeme odebírat vzorek s výrazně nižší frekvencí (v rádech dnů, případně týdnů), zato použít některou ze standardních analytických metod k přesnějšímu stanovení koncentrace. (Tyto metody je nutné přizpůsobit konkrétnímu analytu.) Tato práce se zaměřovala na širokospektré měření, či tzv. necílenou analýzu, neboť před jejím provedením ještě nebylo přesně známo, které látky je vhodné analyzovat. Na základě těchto zjištění lze do budoucna vystavět přesnější metody.

Oproti tomu v případě venkovního měření se senzorická metoda prokázala být více než vhodnou, neboť se podařilo identifikovat přesné časy zdroje polutantů včetně relativního nárůstu jejich koncentrací. Vzhledem k absenci kalibrace některých senzorů byl jejich signál interpretován pouze kvalitativně, tudíž jsou vyobrazeny trendy relativních koncentrací v čase.

Atmosféra je však komplexní a dynamický systém, kdy měřené hodnoty silně závisí na přesném místě a čase odběru, přičemž i při nepatrné změně těchto výchozích stavů se může výsledek velmi lišit. [8] Do budoucna by proto bylo vhodné znásobit počet měřících stanic a rozmístit je po městě a okolí, což by vedlo ke zlepšení směrodatnosti měření.

Validovaná data z ČHMÚ vykazují obecně nižší vzorkovací frekvenci, což zhoršuje časové rozlišení pro interpretaci krátkodobých, především ranních špiček. Oproti našim měřením také postrádají necílené identifikace jednotlivých organických látek i aerosolových frakcí. Data ČHMÚ však využívají selektivnějších metod než námi využití senzory a nástroje pro identifikaci, poskytují tedy pravdivější údaje o absolutní hmotnostní koncentraci v ovzduší.

S využitím plynové chromatografie, resp. hmotnostní spektrometrie, se podařilo identifikovat celkem 19 těkavých organických látek. Nutno poznamenat, že naměřená spektra neobsahují látky přirozeně se vyskytující v aktivním uhlí. Ty byly již odečteny změřením standardního vzorku – tj. samotného, nepoužitého aktivního uhlí. Vzhledem k použitému sorbentu a extrakci nebyly identifikovány látky pod C7 (s počtem uhlíků nižším než 7), což může představovat přípustný nedostatek této metody.

Na příkladu 1,2,3-trimethylbenzenu a 1,3,5-trimethylbenzen (mesitylenu) lze poukázat na to, že i mírná změna v konformaci molekuly ovlivňuje její polární povrch, a v důsledku toho i retenční faktor látky. Velký rozdíl v retenčních časech beta-terpinenu a 3-carenu dokazuje, že retenční čas nezáleží na sumárním vzorci molekuly (resp. její hmotnosti), ale na celkovém tvaru molekuly.

## 7 ZÁVĚR

Výsledkem práce je kombinovaná analytická metoda, která poskytuje komplexní data o stavu ovzduší, jež lze dále využívat k detekci znečišťujících včetně jejich původu. Levné senzory lze využít k vystavění rozsáhlé sítě, na jejímž základě je možné vystavět model, který by umožňoval monitorovat cirkulaci polutantů napříč městem. [4] Citovaná metoda se sice zaměřuje pouze na oxidu dusíku, ale lze analogicky aplikovat na všechny senzory. Tento model má zároveň potenciál zpřesňovat již komerčně měřená data. [5] Metodu je možné dále rozšiřovat, čímž poskytuje podklady pro navazující práci.

Zavedený systém monitoringu ovzduší ČHMÚ poskytuje robustní data validovanými metodikami, alternativní techniky však mohou poskytovat data flexibilněji a s lepším kvalitativním rozlišením. Mnoho firem vyrábí senzorické technologie pro kontinuální sledování kvality ovzduší (SGX senzortech, Crowcon, Alphasense, Sensirion, ...) s velmi variabilní kvalitou senzorů. Tyto technologie jsou relativně levné, dostupné a jednoduché. Pro identifikace VOC a aerosolů bylo využito pokročilých, komplexních a finančně náročnějších technik GC-MS a SEM, které není možné provozovat na každé stanici ČHMÚ. V tomto aspektu je žádoucí kooperace mezi ČHMÚ (případně ČIŽP) s instrumentálně vybavenějšími univerzitami pro realizaci případových studií znečištění ovzduší.

Velmi rád bych pokračoval v práci podobného směru. K té bych chtěl využít moderních metod analytické chemie, se kterými jsem se měl možnost díky této práci seznámit. Též bych si přál opět rozšířit své obzory, osvojit nové vědomosti a schopnosti, v nějakém z příbuzných oborů, které by mi umožnili efektivněji a komplexněji řešit problémy týkající se životního prostředí. Problematika ovzduší (a jeho znečišťování) je totiž jen lidově zvanou špičkou ledovce celé problematiky životního prostředí a jeho ochrany, neboť se jedná o mohutně provázaný celek, který svými složitými vztahy přesahuje hluboko do dalších odvětví lidského poznání.

## 8 BIBLIOGRAFIE

- [1] ZEMANKOVA, Katerina a Josef BRECHLER. Emissions of biogenic VOC from forest ecosystems in central Europe: Estimation and comparison with anthropogenic emission inventory. *Environmental Pollution* [online]. 2010, **158**(2), 462-469 [cit. 2023-02-09]. ISSN 02697491. Dostupné z: doi:10.1016/j.envpol.2009.08.032
- [2] BALDWIN, Ian T., Rayko HALITSCHKE, Anja PASCHOLD, Caroline C. VON DAHL a Catherine A. PRESTON. Volatile Signaling in Plant-Plant Interactions: "Talking Trees" in the Genomics Era. *Science* [online]. 2006, **311**(5762), 812-815 [cit. 2023-02-09]. ISSN 0036-8075. Dostupné z: doi:10.1126/science.1118446
- [3] CUCCINIELLO, Raffaele, Antonio PROTO, Federico ROSSI, Nadia MARCHETTINI a Oriana MOTTA. An improved method for BTEX extraction from charcoal. *Analytical Methods* [online]. 2015, **7**(11), 4811-4815 [cit. 2023-02-09]. ISSN 1759-9660. Dostupné z: doi:10.1039/C5AY00828J
- [4] SCHNEIDER, Philipp, Nuria CASTELL, Matthias VOGT, Franck R. DAUGE, William A. LAHOZ a Alena BARTONOVA. Mapping urban air quality in near real-time using observations from low-cost sensors and model information. *Environment International* [online]. 2017, **106**, 234-247 [cit. 2023-02-09]. ISSN 01604120. Dostupné z: doi:10.1016/j.envint.2017.05.005
- [5] CASTELL, Nuria, Franck R. DAUGE, Philipp SCHNEIDER, Matthias VOGT, Uri LERNER, Barak FISHBAIN, David BRODAY a Alena BARTONOVA. Can commercial low-cost sensor platforms contribute to air quality monitoring and exposure estimates?. *Environment International* [online]. 2017, **99**, 293-302 [cit. 2023-02-09]. ISSN 01604120. Dostupné z: doi:10.1016/j.envint.2016.12.007
- [6] SKOOG, Douglas A., Donald M. WEST, F. James HOLLER a Stanley R. CROUCH. *Analytická chemie*. Přeložil Karel NESMĚRÁK, přeložil Václav ČERVENÝ, přeložil Tomáš KRÍŽEK, přeložil Eliška NOVÁKOVÁ. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 2019. ISBN isbn:978-80-7592-043-0.
- [7] SKÁCEL, František a Viktor TEKÁČ. *Analýza ovzduší*. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 2019. ISBN isbn,978-80-7592-038-6.
- [8] RICHTER, Miroslav. *Technologie ochrany životního prostředí*. Ústí nad Labem: Fakulta životního prostředí, 2004. ISBN isbn,80-7044-585-8.
- [9] POLSTER, Petr. *Jak (úspěšně) napsat závěrečnou práci*. Ústí nad Labem: Univerzita J.E. Purkyně v Ústí nad Labem, Fakulta životního prostředí, 2009. ISBN isbn,978-80-7414-203-1.



## 9 SEZNAM OBRÁZKŮ, TABULEK A GRAFŮ

Obrázek 1: Hmotnostní spektrum toluenu .....	15
Obrázek 2: Kvadrupól.....	15
Obrázek 3: Kaskádový impaktor .....	16
Obrázek 4: Impaktor po demontáži.....	16
Obrázek 4: Senzor DHT22.....	20
Obrázek 5: Senzor BME680 .....	20
Obrázek 6: Ukázka elektrochemických senzorů od Alphasense .....	21
Obrázek 7: Schéma fyzikálního principu funkce fotoionizačního detektoru.....	22
Obrázek 8: Schéma fyzikálního principu funkce senzoru rozptylu světla.....	23
Obrázek 9: Rozložení a funkce vstupně-výstupních pinů na Raspberry Pi 4B+ .....	25
Obrázek 10: Typické rozmístění pinů na senzoru.....	26
Obrázek 11: Příklad propojení zařízení užitím I <sup>2</sup> C sběrnice .....	26
Obrázek 12: Blokové schéma bytových sekvencí pro komunikaci se senzorem.....	27
Obrázek 13: Výňatek z datového listu – sekvence pro čtení dat .....	27
Obrázek 14: Ukázka kódu zodpovědného za třídění dat dle druhu senzoru .....	30
Obrázek 15: Ukázka kódu, jež zabezpečuje odečet frakcí.....	31
Obrázek 16: Sorpční trubičky Anasorb CSC .....	32
Obrázek 17: Kalibrovaná pumpa SKC Touch .....	32
Obrázek 18: SEM frakce PM2.5 .....	39
Obrázek 19: Prvkové mapování frakce PM2.5 .....	39
Obrázek 20: SEM frakce PM1.0.....	40
Obrázek 21: Prvkové mapování frakce PM1.0 .....	40
Obrázek 22: SEM frakce PM0.50 .....	41
Obrázek 23: Prvkové mapování frakce PM0.50 .....	41
Obrázek 24: SEM frakce PM0.25 .....	42
Obrázek 25: Prvkové mapování frakce PM0.25 .....	42
Obrázek 26: Detailní SEM snímek frakce PM0.50 .....	45
Obrázek 27: Křísek polní - <i>Psammotettix alienus</i> .....	45
Tabulka 1: Provozní parametry senzoru BME 680.....	20
Tabulka 2: Provozní parametry senzoru VZ89TE .....	21
Tabulka 3: Identifikované těkavé organické látky.....	37
Graf 1: Schéma přenosu dat prostřednictvím SMBus.....	27
Graf 2: Surová senzorická data bez provedení separace jednotlivých frakcí .....	28
Graf 3: Zpracovaný záznam senzorického měření chemických látek v 5. patře CPTO. ....	34
Graf 4: Zpracovaný záznam senzorického měření chemických látek na střeše CPTO. ....	34
Graf 5: Zpracovaný záznam senzorického měření prachových částic v 5. patře CPTO.....	35
Graf 6: Zpracovaný záznam senzorického měření prachových částic na střeše CPTO.....	35
Graf 7: Píky látek identifikovaných z odběru provedeném v 5. patře CPTO. ....	36
Graf 8: Píky látek identifikovaných z odběru provedeném na střeše CPTO. ....	36