

IDENTIFIKACE TĚKAVÝCH LÁTEK OBSAŽENÝCH V RŮŽÍCH

Hlavním cílem předložené diplomové práce bylo vypracování metody pro extrakci a identifikaci sloučenin obsažených v různých vzorcích růží. Diplomová práce je po experimentální i obsahové stránce přiměřeně rozsáhlá.

V teoretické části diplomantka zpracovala rešerši týkající se esenciálních olejů, konkrétně jejich základních vlastností a účinků na organizmus, dále izolaci esenciálních olejů z rostlinného materiálu a následně separace a identifikace jednotlivých složek. Možnosti analýzy jsou uvedeny se zaměřením na aplikaci plynové chromatografie jako analytické koncovky. Rešerše je přehledná a srozumitelná s dostatečným výčtem citací odborné literatury.

V praktické části diplomantka prezentuje výsledky analýz šesti vzorků okvětních plátků růží pomocí mikroextrakce tuhou fází (SPME) a plynové chromatografie ve spojení s hmotnostní detekcí (GC-MS). Za tímto účelem byla nejprve provedena optimalizace teplotního programu GC separace. U SPME byly na reálném vzorku růže optimalizovány tři parametry (navážka vzorku, teplota extrakce a doba extrakce) pro dva typy SPME vláken s různými sorbenty (100 μm PDMS, 50/30 μm DVB/CAR/PDMS). Dále byl testován vliv úpravy vzorku (drcení, mletí) na SPME.

Statistické vyhodnocení optimalizace SPME bylo provedeno podle několika závislých proměnných. Nakonec byl pro každé testované vlákno vybrán model nejlépe popisující extrakční proces (modely s vysokými hodnotami R-kvadrátu), který byl použit pro vyhodnocení optimálních extrakčních podmínek. Závislou proměnnou, se kterou tyto modely vykazovaly vysokou spolehlivost v popisu extrakčního procesu, byla suma všech píků v chromatogramu. Oceňuji úsilí diplomantky, které vynaložila na tvorbu příloh se statistickými modely, které nakonec nebyly z důvodu nízké spolehlivosti použity pro vyhodnocení optimálních extrakčních podmínek. Jsem toho názoru, že i kdyby nebyly tyto přílohy uvedeny, v žádném případě by to nesnížilo odbornost a srozumitelnost výsledné práce.

K práci mám následující připomínky, náměty pro diskuzi a dotazy:

- Str. 13, kapitola 2.1.4.2: dobromysl je ženského rodu, tzn. esenciální olej je z dobromysli, ne z dobromyslu.
- Str. 18, kapitola 2.2.1, 1. odstavec: citovaná norma ČSN ISO 6571 byla zrušena a nahrazena s účinností od 1. 11. 2009 normou ČSN EN ISO 6571.
- Str. 21, poslední odstavec: jsou zde zmiňovány extrakční metody SDE (simultaneous distillation extraction) a SAFE (solvent-assisted flavour evaporation). Jaké je praktické uspořádání (provedení) těchto extrakcí?
- Str. 25, 1. odstavec: je zde zmiňován split jako důležitý parametr pro separaci plynovou chromatografií. Co je to split, co ovlivňuje a jakým českým ekvivalentem by šel nahradit?
- Str. 26, kapitola 2.3.3, poslední odstavec: formulace poslední věty není správná, spektra se neměří pro elektronovou ionizaci, ale elektronová ionizace je využívána pro měření hmotnostních spekter

látek. Jaká musí být nastavena hodnota ionizační energie při elektronové ionizaci, pokud chceme výsledná hmotnostní spektra porovnávat s knihovnou spekter?

- Str. 32, kapitola 3.3.2, 1. odstavec: proč byla pro extrakce vybrána zrovna tato vlákna (100 μm PDMS, 50/30 μm DVB/CAR/PDMS) a jak se od sebe liší?

- Str. 38, obr. 12 a 13 – chybí jednotky jednotlivých testovaných parametrů, stejně tak na str. 39 (obr. 14 a 15) a v přílohách 5-8 (str. 70-71) a 15-18 (str. 74-76)

- U všech chromatogramů chybí popisy os X a Y

- Zápis sloučenin by měl mít stejný formát, v tabulkách jsou zapsány jak s velkým tak s malým počátečním písmenem (např. str. 47: 2-nonenal a 2-Undecenal, 2-fenoxyetanol a 1-Fenoxypropan-2-ol atd.). Názvosloví je dobře převedeno do české varianty názvů, ojediněle se najde nepřesný převod, např. str. 47: Phyton (anglicky Phytone, česky Fyton).

- u sloučeniny n-damaskon se asi jedná o překlep v názvu, podle CAS čísla je to β -damaskon, cis izomer

- Seznam literatury: zdroje č. 25 a 30 mají špatný (neúplný) formát (chybí rok vydání, svazek, číslo vydání, stránky).

Výše uvedené poznámky nesnižují hodnotu práce jako takové, ale další dvě připomínky už jsou závažnějšího charakteru:

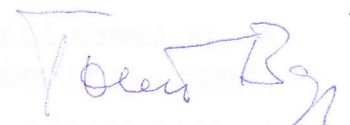
- V experimentální části diplomové práce postrádám tabulku s retenčními časy homologické řady alkanů, podle kterých byly počítány retenční indexy pro identifikaci jednotlivých sloučenin.

- Vzhledem k tomu, že pro SPME těkavých látek z reálných vzorků nakonec byla využita obě testovaná vlákna a výsledky se u jednotlivých vzorků lišily, tak dle mého názoru chybí v kapitole 4 diskuze o sorbentech, kterými jsou obě vlákna vybavena a o mechanismech, kterými se jednotlivé skupiny stanovených těkavých látek na tyto sorbenty vážou (absorpce/adsorpce).

Závěrem konstatuji, že předložená diplomová práce **Bc. Terezy Poláčkové** splňuje požadavky kladené na diplomové práce, doporučuji ji k obhajobě a navrhuji hodnocení:

– v ý b o r n ě - m –

V Pardubicích dne 22. května 2015



Ing. Tomáš Bajer, Ph.D.

Oponent diplomové práce