

Stanovení nízkomolekulárních těkavých látek v kurkumě pomocí (HS-SPME)-GC-MS

Daniel Kašík

Bakalářská práce
2025



Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta technologická

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně

Fakulta technologická

Ústav chemie

Akademický rok: 2024/2025

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(projektu, uměleckého díla, uměleckého výkonu)

Jméno a příjmení:	Daniel Kašík
Osobní číslo:	T22541
Studijní program:	B0721A210002 Technologie a hodnocení potravin
Specializace:	Chemie a analýza potravin
Forma studia:	Prezenční
Téma práce:	Stanovení nízkomolekulárních těkavých látek v kurkumě pomocí (HS-SPME)-GC-MS

Zásady pro vypracování

I. Teoretická část

1. Kurkuma – obecná charakteristika, chemické složení, využití v potravinářství.
2. Plynová chromatografie s hmotnostně-spektrometrickou detekcí.
3. Využití (HS-SPME)-GC-MS v analýze potravin.

II. Praktická část

1. Optimalizovat parametry pro (HS-SPME)-GC-MS analýzu přidělených vzorků.
2. Provést kvalitativní a kvantitativní analýzu přidělených vzorků kurkumy pomocí (HS-SPME)-GC-MS.
3. Získané výsledky vhodným způsobem vyhodnotit se zaměřením na strukturní charakteristiku detekovaných sloučenin.
4. Získané výsledky zpracovat, vyhodnotit a provést jejich interpretaci.

Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná/elektronická**

Seznam doporučené literatury:

1. Filatova, M., Hajslova, J., Stupak, M. *Eur. Food Res. Technol.* **2024**, 250, 911–922.
2. Rai, A. et al. *J. Appl. Res. Aromat. Plants* **2022**, 26, 100357.
3. Dosoky, N. S., Satyal, P., Setzer, W. N. *Foods* **2019**, 8, 53.
4. S využitím databází SciFinder a Scopus.

Vedoucí bakalářské práce: **Ing. Michal Kovář**
Ústav chemie

Datum zadání bakalářské práce: **2. ledna 2025**
Termín odevzdání bakalářské práce: **16. května 2025**

L.S.

prof. Ing. Roman Čermák, Ph.D.
děkan

doc. Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
ředitel ústavu

Ve Zlíně dne 20. února 2025

PROHLÁŠENÍ AUTORA BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Beru na vědomí, že

- odevzdáním bakalářské práce souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb., v platném znění bez ohledu na výsledek obhajoby;
- bakalářská práce bude uložena v elektronické podobě v univerzitním informačním systému a bude dostupná k nahlédnutí;
- jedno vyhotovení bakalářské práce v listinné podobě bude ponecháno Univerzitě Tomáše Bati ve Zlíně k uložení;
- na moji bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších právních předpisů, zejm. § 35 odst. 3;
- podle § 60 odst. 1 autorského zákona má Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně právo na uzavření licenční smlouvy o užití školního díla v rozsahu § 12 odst. 4 autorského zákona;
- podle § 60 odst. 2 a 3 mohu užít své dílo – bakalářskou práci – nebo poskytnout licenci k jejímu využití jen s předchozím písemným souhlasem Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně, která je oprávněna v takovém případě ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které byly Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše);
- pokud bylo k vypracování bakalářské práce využito softwaru poskytnutého Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně nebo jinými subjekty pouze ke studijním a výzkumným účelům (tj. k nekomerčnímu využití), nelze výsledky bakalářské práce využít ke komerčním účelům;
- pokud je výstupem bakalářské práce jakýkoliv softwarový produkt, považují se za součást práce rovněž i zdrojové kódy, popř. soubory, ze kterých se projekt skládá; neodevzdání této součásti může být důvodem k neobhájení práce.

Prohlašuji, že

- jsem na bakalářské práci pracoval(a) samostatně a použitou literaturu jsem řádně citoval(a); v případě publikace výsledků budu uveden(a) jako spoluautor;
- odevzdaná verze bakalářské práce a verze elektronická nahraná do IS/STAG jsou obsahově totožné.

Ve Zlíně, dne

.....
podpis autora

ABSTRAKT

Tato bakalářská práce se zabývá analýzou nízkomolekulárních těkavých látek obsažených v kurkumě (*Curcuma longa*) s využitím metody head space mikroextrakce z pevné fáze v kombinaci s plynovou chromatografií a hmotnostní spektrometrií ((HS-SPME)-GC-MS). Cílem práce bylo optimalizovat podmínky extrakce a analýzy pro různé typy kurkumy (BIO, sušená, čerstvá) a provést kvalitativní i kvantitativní hodnocení těkavých složek. Byly testovány různé typy SPME vláken, teplotní programy, navážky vzorků a přidavek nasyceného roztoku NaCl. Analýzou bylo identifikováno více než 50 těkavých látek, mezi nimiž dominují monoterpeny a seskviterpeny, jako je α -turmeron, β -turmeron, zingiberen a karyofylen. Práce přináší poznatky o složení těkavých látek v různých typech kurkumy a ukazuje možnosti využití (HS-SPME)-GC-MS v potravinářské analýze.

Klíčová slova: kurkuma, těkavé látky, HS-SPME, GC-MS, optimalizace, analýza

ABSTRACT

This bachelor thesis deals with the analysis of low-molecular-weight volatile compounds present in turmeric (*Curcuma longa*) using headspace solid-phase microextraction in combination with gas chromatography and mass spectrometry ((HS-SPME)-GC-MS). The aim of the thesis was to optimize the extraction and analysis conditions for different types of turmeric (organic, dried, fresh) and to perform both qualitative and quantitative evaluation of volatile components. Various types of SPME fibers, temperature programs, sample weights, and the addition of saturated NaCl solution were tested. More than 50 volatile compounds were identified by analysis, among which monoterpenes and sesquiterpenes such as α -turmerone, β -turmerone, zingiberene, and caryophyllene predominated. The thesis provides insights into the composition of volatile compounds in different types of turmeric and demonstrates the potential of (HS-SPME)-GC-MS for the food analysis.

Keywords: turmeric, volatile compounds, HS-SPME, GC-MS, optimization, analysis

Zde bych chtěl poděkovat doktoru Janovskému za poskytnutí odborné konzultace a nástroje pro grafickou úpravu. Dále inženýru Kovářovi za vedení a odborné konzultace v průběhu psaní práce. Bobovi Boudovi za odborné konzultace ohledně voliš. Všem těm jednorožcům že jsem měl tu možnost je v kurkumě stanovovat a jak říká Horatius: „*Carpe diem.*“

OBSAH

ÚVOD	11
I TEORETICKÁ ČÁST	12
1 KURKUMA.....	13
1.1 OBECNÁ CHARAKTERISTIKA	13
1.2 CHEMICKÉ SLOŽENÍ.....	14
1.2.1 Obecné složení	14
1.2.2 Kurkuminoidy	14
1.2.3 Esenciální oleje.....	15
1.2.4 Procentuální zastoupení:	16
1.3 VYUŽITÍ V POTRAVINÁŘSTVÍ.....	16
1.3.1 Využití kurkuminoidů.....	16
1.3.2 Využití esenciálních olejů.....	17
1.3.3 Expoziční limity	17
2 PLYNOVÁ CHROMATOGRAFIE S HMOTNOSTNĚ- SPEKTROMETRICKOU DETEKCÍ.	18
2.1 ÚVOD PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE	18
2.2 OBECNÁ TEORIE CHROMATOGRAFIE	18
2.3 HMOTNOSTNĚ-SPEKTROMETRICKÁ DETEKCE.....	20
2.3.1 Princip MS	20
2.3.2 Iontový zdroj	20
2.3.3 Elektronová ionizace	20
2.3.4 Trojitý kvadrupól.....	21
2.3.5 Detektory.....	22
3 VYUŽITÍ (HS-SPME)-GC-MS V ANALÝZE POTRAVIN	24
3.1 ÚVOD	24
3.2 MECHANISMUS HS-SPME.....	24
3.2.1 Rychlost a množství adsorpce	25
Typy polymerních vláken.....	25
3.3 VYUŽITÍ (HS-SPME)-GC-MS V ANALÝZE POTRAVIN	27
3.3.1 Mléko.....	27
3.3.2 Maso	27
3.3.3 Oleje.....	27
II PRAKTICKÁ ČÁST.....	28
1.1 PŘÍSTROJE A ZAŘÍZENÍ.....	29
2 METODY ANALÝZY	30
2.1 VZORKY.....	30
2.2 PŘÍPRAVA VZORKŮ.....	30

2.3	METODA GC.....	30
2.4	PARAMETRY SPME VLÁKEN	32
3	VYSLEDKY A DISKUZE	34
3.1	OPTIMALIZACE VLÁKEN	34
3.2	OPTIMALIZACE VZORKOVÁNÍ – PŘÍDAVEK NaCl.....	36
3.3	OPTIMALIZACE VZORKOVÁNÍ – NAVÁŽKA	38
3.4	OPTIMALIZACE TEPLITNÍHO MODELU	40
3.4.1	Teplotní program 1	40
3.4.2	Teplotní program 2.....	42
3.5	ANALÝZA BIO KURKUMY	44
3.6	ANALÝZA SUŠENÉ KURKUMY	48
3.7	ANALÝZA ČERSTVÉ KURKUMY	52
4	SOUHRN ANALYZOVANÝCH LÁTEK V KURKUMĚ	56
4.1	SEZNAM VŠECH ANALYZOVANÝCH SLOŽEK KURKUMY	56
5	ZÁVĚR.....	64
	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	65
	SEZNAM OBRÁZKŮ.....	73
	SEZNAM TABULEK	74
	SEZNAM GRAFŮ	75
	SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK	76

ÚVOD

Kurkuma (*Curcuma longa*) je rostlina pocházející z jihovýchodní Asie, která se již dlouhou dobu používá jako koření, barvivo, nebo léčivá rostlina. Nejčastěji se s ní setkáváme v podobě žlutého prášku, který je součástí různých pokrmů, zejména v indické kuchyni. Kurkuma je známá nejen svou výraznou barvou, ale také typickou vůní a chutí. Tyto vlastnosti jsou dány přítomností různých chemických látek, mezi které patří i nízkomolekulární těkavé látky.

Těkavé látky jsou důležité nejen pro chuť a vůni kurkumy, ale také mohou mít vliv na její zdravotní účinky. Některé z nich mají například antioxidační nebo protizánětlivé vlastnosti. Proto je důležité znát jejich složení a množství v různých typech kurkumy.

Analýza těkavých látek v kurkumě je velice komplexní, protože se vyskytují v malých množstvích a v různých formách. V současné době se pro jejich zjištění často používá metoda headspace mikroextrakce z pevné fáze (HS-SPME) v kombinaci s plynovou chromatografií a hmotnostní spektrometrií (GC-MS). Tato metoda umožňuje účinně oddělit a identifikovat jednotlivé těkavé látky.

Cílem této práce je optimalizovat podmínky pro izolaci a analýzu nízkomolekulárních těkavých látek v různých typech kurkumy (BIO, sušená, čerstvá) pomocí metody (HS-SPME)-GC-MS. Dále bude provedeno srovnání složení těkavých látek mezi jednotlivými vzorky a zhodnocení získaných výsledků.

I TEORETICKÁ ČÁST

1 KURKUMA

1.1 Obecná charakteristika

Curcuma longa z čeledi zázvorníkovité spadá do skupiny vytrvalých bylin s oddenky, původem z tropických a subtropických oblastí.[1] Aktuálně je přibližně okolo sta uznávaných druhů *Curcuma*, avšak nejvíce studovanými druhy jsou *Curcuma longa* a *Curcuma zedoria*. Ve světě je však pod pojmem kurkuma označována právě *Curcuma longa*. [2]

Curcuma longa původem z jihovýchodní Asie je komerčně dostupná jako oddenek nebo ve formě prášku a je nejčastěji používaným druhem kurkumy. V současnosti je největším výrobcem i spotřebitelem Indie. [3,4,5]

Využití kurkuma nachází v oblasti aromatických látek, medicíně a v potravinářství, jakožto barvivo nebo koření [6]. Nejčastěji využívanou částí rostliny je oddenek, který obsahuje převážně nevolatilní kurkuminoidy a těkavé oleje [7-9].



Obrázek 1 Kurkumovník dlouhý (*Curcuma longa*) [57]

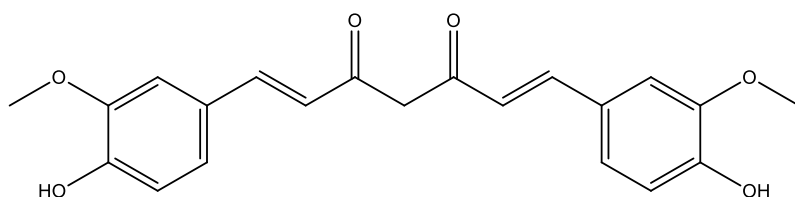
1.2 Chemické složení

1.2.1 Obecné složení

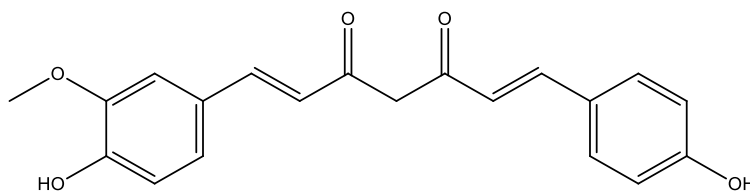
Oddenek kurkumy obsahuje přibližně 69,4 % sacharidů, 6,3 % bílkovin, 5,1 % lipidů a 3,5 % minerálních látek [10]. Zbytek tvoří voda, esenciální oleje (seskviterpenoidy a monoterpenoidy) a kurkuminoidy [11,12].

1.2.2 Kurkuminoidy

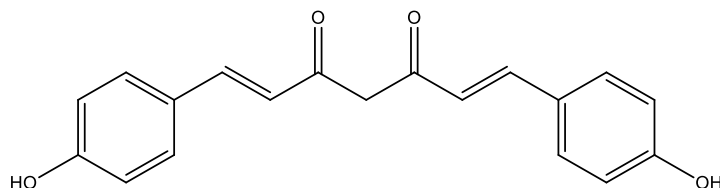
Kurkuminoidy jsou polyfenolické sloučeniny, mezi něž patří kurkumin, demetoxykurkumin nebo bisdemehoxykurkumin [11,12]. Kurkumin, nejaktivnější kurkuminoid v oddencích, má protirakovinné [13], protizánětlivé [14], antioxidační [15], antibakteriální, protiplísňové [16], analgetické, trávicí, antidepresivní a hypoglykemické vlastnosti [17] a též prokázal potenciál proti kardiovaskulárním onemocněním [18] nebo Alzheimerově chorobě. [19]



Obrázek 2 Kurkumin



Obrázek 3 Demetoxykurkumin

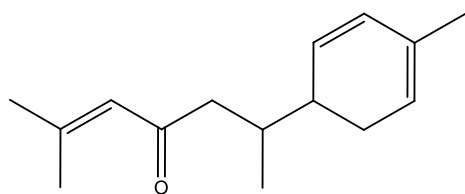


Obrázek 4 Bisdemetoxykurkumin

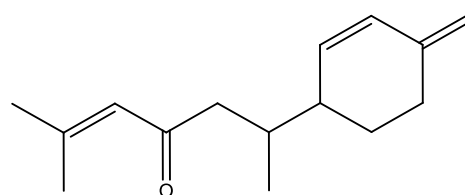
1.2.3 Esenciální oleje

Esenciální olej získávaný destilací nebo extrakcí superkritickou kapalinou z čerstvého či suchého oddenku [20,21] obsahuje převážně seskviterpenoidy a monoterpenoidy [22]. Jeho složení se výrazně liší v závislosti na klimatu, genotypu rostliny, době sklizně, způsobu extrakce i použité analytické metodě [23-25].

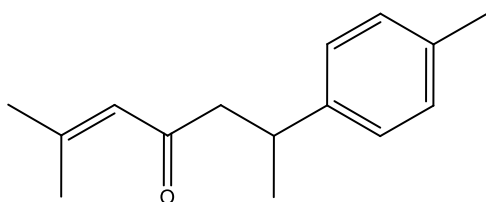
Mezi nejčastěji se vyskytující látky v esenciálním oleji kurkumy patří:



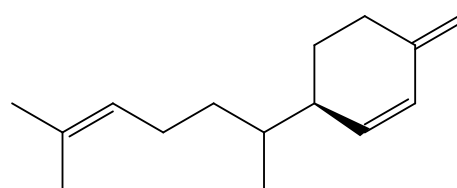
Obrázek 5 α -turmeron



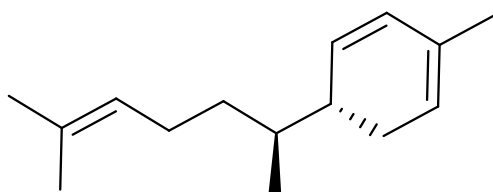
Obrázek 6 β -turmeron



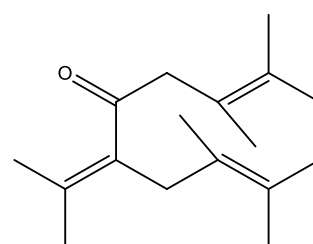
Obrázek 7 Ar-turmeron



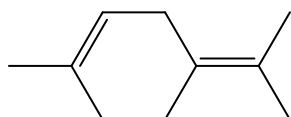
Obrázek 8 β -seskvifelandren



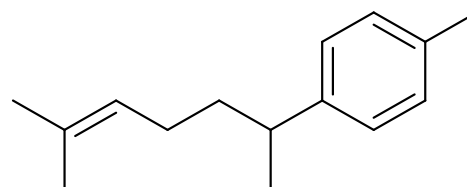
Obrázek 9 Zingiberen



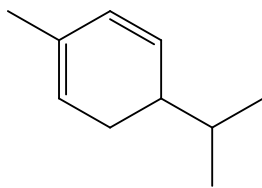
Obrázek 10 Germakron



Obrázek 11 Terpinolen



Obrázek 12 Ar-kurkumen

Obrázek 13 α -felandren

1.2.4 Procentuální zastoupení:

Tabulka 1: Procentuální zastoupení sloučenin v esenciálním oleji

Název sloučeniny	Obsah v esenciálním oleji [%]
α -turmeron	(12,6-44,5 %)
β -turmeron	(9,1-37,8 %)
Ar-turmeron	(12,2-36,6 %)
β -seskvifelandren	(5,0-14,6 %)
Zingiberen	(5,0-12,8 %)
Germakron	(10,3-11,1 %)
Terpinolen	(10,0-10,2 %)
Ar-kurkumen	(5,5-9,8 %)
α -felandren	(5,0-6,7 %)

Složení bioaktivních či aromatických látek se může značně lišit v závislosti na daných faktorech. V *Curcuma longa*, kterou se budeme nadále zabývat a kterou budeme analyzovat na (HS-SPME)-GC-MS mohou být látky obsažené v oddencích značně ovlivněny způsobem zpracování i způsobem izolace. Majoritně jsou v kurkumě obsaženy látky výše zmíněné [26].

1.3 Využití v potravinářství

1.3.1 Využití kurkuminoidů

Kurkuma je běžně využívána jako koření kari nebo jako přísada do vanilkového pudinku, sýru, jogurtu, hořčici či margarínu. Kurkumin obsažený v kurkumě je označován jako přídatná látka s kódem E 100. Jeho využití je jako barvivo, typicky žluté barvy a používá se

například jako přísada do hořčice, těstovin, chleba a v některých zemích i třeba másla [27-29].

1.3.2 Využití esenciálních olejů

Díky své antioxidační a antimikrobiální aktivitě proti běžným bakteriím a houbám přenosným potravinami jsou esenciální oleje obsažené v kurkumě studovány v rámci zlepšení uchovávání a prodloužení trvanlivosti potravin, či zlepšení vlastností obalových materiálů. Esenciální oleje získané z bylin a koření se ukázaly být účinnější než syntetické chemické přísady. [30]. Byly aplikovány na uchovávání masa a masných výrobků [31], chleba [32], mléčných produktů [33], vodních potravin [34] a ovoce a zeleniny [35]. Použití esenciálních olejů při konzervaci potravin je však spojeno s určitými omezeními kvůli jejich vysoké těkavosti, nízké lipofilii a snadné degradaci. Tato omezení lze překonat enkapsulací esenciálních olejů [36].

Esenciální oleje mohou být přínosné v oblasti udržitelného zemědělství. Prokázaly významnou aktivitu proti rostlinným patogenům, plevelům a širokému spektru mikroorganismů v různých in vitro a in planta studiích. [37]. Díky svým výrazným fytotoxickým vlastnostem jsou vhodnými kandidáty pro vývoj nových bio herbicidů [38]. Mají také potenciální využití jako pesticidy v rámci integrované ochrany rostlin a ekologického zemědělství, jelikož jsou šetrné k životnímu prostředí [39]. Esenciální oleje by mohly hrát potenciální roli v prodlužování životnosti obalových vrstev ovoce tím, že brání ovoce po sklizni proti patogenům [40].

1.3.3 Expoziční limity

Bezpečná úroveň příjmu kurkuminu (E 100) byl dle EFSA stanovena na 180 mg u dospělé osoby o hmotnosti 60 kg [41]. Dle nařízení (ES) č. 1333/2008 je používání kurkuminu podmíněné specifickými limity pro použití kurkuminu v různých kategoriích potravin. Dle legislativy kurkumin musí být bezpečný, technologicky nezbytný a jeho užití musí přinášet užitek [42].

2 PLYNOVÁ CHROMATOGRAFIE S HMOTNOSTNĚ- SPEKTROMETRICKOU DETEKCÍ.

2.1 Úvod plynové chromatografie

Plynová chromatografie (GS) má významné postavení v analýze těkavých látek. Tento typ separační metody funguje na principu afinity analytu k pohyblivé (mobilní) a nepohyblivé (stacionární) fázi. U plynové chromatografie je pohyblivou fází inertní plyn, typicky dusík, helium, vodík. Tyto plyny při metodě GS putují kolonou, ve které je umístěna fáze stacionární a nesou s sebou daný typicky těkavé nebo nízko těkavé analyty. Analyty jsou unášeny fází mobilní a při kontaktu se stacionární fází dochází opakovaně k jejich adsorpci a desorpci. Dle afinity daného analytu k fázi mobilní či stacionární, která je dána převážně chemickou strukturou dvou fází a analytu, je průchod kolonou buďto rychlejší, nebo pomalejší. Například při použití polární stacionární fáze a nepolárního analytu taženým typicky nepolárním plynem, bude průchod kolonou rychlejší než při použití analytu polárního. Analyt poté, co projde kolonou, se dostává do detektoru, kterým je hmotnostní spektrometr. Ten rozděluje analyt na ionty, které jsou dále separovány dle podílu hmotnosti ku náboji. [43]

2.2 Obecná teorie chromatografie

Plynovou chromatografii je možno využít ke kvantitativnímu i kvalitativnímu stanovení analytu ve vzorku. Výsledkem chromatografického měření je potom signál. Signál je zpracován pomocí detektorů, které mohou být různé (TCD, ECD, FID, MS, atd.). Signál, který detektor zachytí, udává obsah a citlivost detekčního zařízení. Faktor, který určuje složení se nazývá retenční čas (t_R) a udává, kolik času strávil analyt v koloně. Lze ho vypočítat z rovnice: [43]

$$t_R = \frac{L}{u'}$$

Kde: L = délka kolony v cm

u' = průměrná lineární rychlost analytu

Další důležitá veličina je mrtvý retenční čas, ten udává za jak dlouho projde mobilní fáze kolonou. Pro zjištění mrtvého retenčního času se typicky používá plyn, který má velice

malou afinitu k stacionární fázi a zároveň je snadno detekovatelný detektorem. Mrtvý retenční čas je dán rovnicí:

$$t_M = \frac{L}{u}$$

kde t_M = mrtvý retenční čas

L = délka kolony v cm

u = lineární rychlost mobilní fáze v koloně

Čas, který analyt stráví ve stacionární fázi se nazývá redukovaný retenční čas a lze jej vyjádřit vztahem:

$$t_{R'} = t_R - t_M$$

kde $t_{R'}$ = redukovaný retenční čas

t_R = retenční čas

t_M = mrtvý retenční čas

Jelikož u chromatografie není důležitý jen čas, za jak dlouho analyt kolonou projde, ale také objem mobilní fáze. Je nutné zmínit pojmy, jako je **retenční objem**. Ten vyjadřuje množství (ml) jaké musí projít kolonou, aby se analyt dostal na konec separační kolony. **Mrtvý objem kolony** udává množství mobilní fáze, která musí projít kolonou, aby se nezadržovaný analyt dostal na konec kolony. **Mrtvý čas kolony** vyjadřuje čas, kdy se analyt pohybuje stejnou rychlostí jako mobilní fáze.[43]

2.3 Hmotnostně-spektrometrická detekce

2.3.1 Princip MS

Principem hmotnostní spektrometrie je, obdobně jako u chromatografie, rozdělení daného analytu. V případě MS z anglického mass-spectrometry se jedná o rozdělení na základě interakcí nabitých částic při vakuu v magnetickém a elektrickém poli. Existuje více druhů hmotnostních spektrometrů, ale všechny obsahují:[44]

1. Iontový zdroj
2. Analyzátor
3. Detektor částic

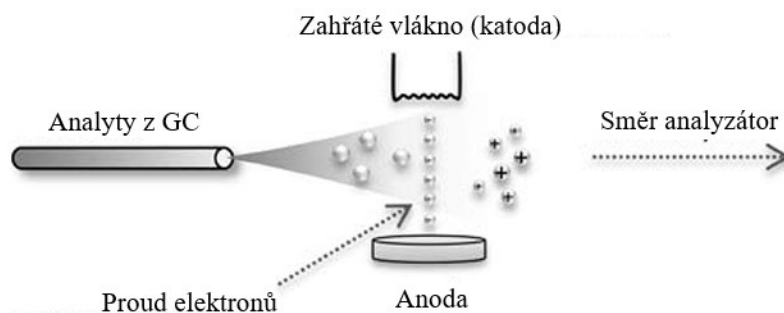
2.3.2 Iontový zdroj

Úkolem iontového zdroje je vytvořit z analytu ionty v plynné fázi. Tyhle kladně nebo záporně nabitě ionty pak putují při vakuu do analyzátoru.

Iontových zdrojů existují desítky, ale obecně se dají rozdělit na tvrdé a měkké dle množství energie, kterou při ionizaci uvolňují. [44]

2.3.3 Elektronová ionizace

Typickou tvrdou ionizační metodou je elektronová ionizace. Principem téhle metody je přenesení energie proudu elektronů do molekul analytu, čímž dochází k tvorbě kladně nabitých radikál a jeho fragmentační spektrum. Typicky je tenhle typ využíván u spojení plynové chromatografie a hmotnostního spektrometru (GS-MS). Výhodou téhle metody je, že při fragmentaci vznikají bohatá fragmentační spektra, která je možné porovnat s knihovnou spekter a vyhodnotit na jejich základě strukturu analyzované sloučeniny.[44]



Obrázek 14 Schéma elektronové ionizace [44]

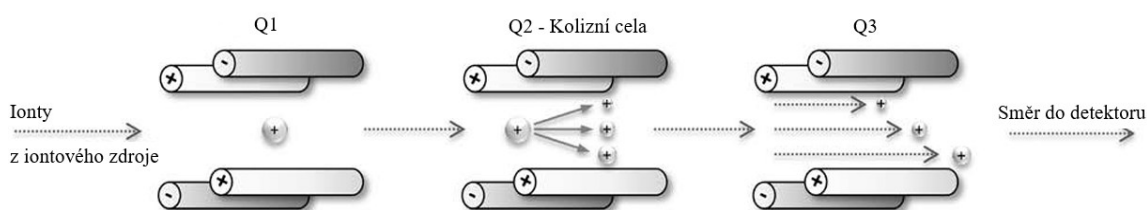
2.3.4 Trojitý kvadrupól

Trojitý kvadrupól je hojně využívaný hmotnostní analyzátor. Mezi jeho přednosti patří relativně nízká cena, mechanická odolnost, citlivost a látková specifita. V trojitém kvadrupólu jsou umístěny dva kvadrupóly, které fungují jako hmotnostní analyzátoři. Uprostřed se nachází kolizní cela, která nemusí být nutně kvadrupól. Ionty procházejí prvním kvadrupólem, kde jsou urychleny. Urychlené ionty narážejí v kolizní cele do plynu (argon, dusík), kde při nárazu dochází k jejich fragmentaci. Fragmenty následně postupují do druhého kvadrupólu.

Trojitý kvadrupól má 4 režimy:

1. Sken produktových iontů

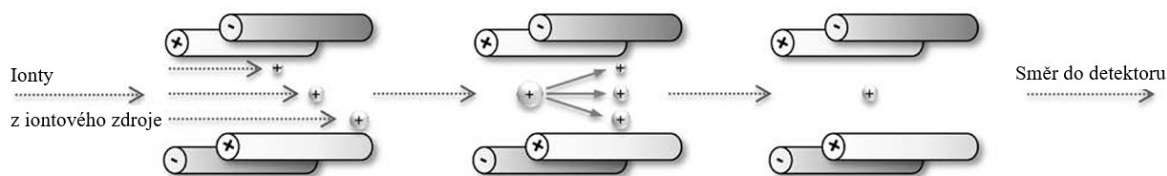
První kvadrupól selektivně propouští ionty s danou hodnotou hmotnosti vůči náboji, aby mohly být v kolizní cele fragmentovány. Třetí kvadrupól skenuje fragmenty v definovaném rozsahu hmotnosti vůči náboji a detektor je zaznamenává.



Obrázek 15 Schéma trojitého kvadrupólu při skenu produktových iontů [44]

2. Sken prekurzorových iontů

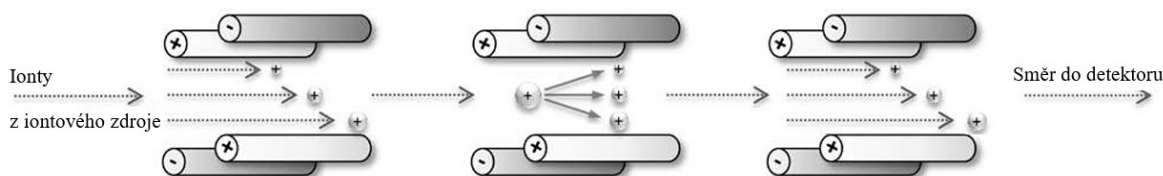
První kvadrupól skenuje molární hmotnost iontu vůči náboji a postupně propouští ionty s její narůstající hodnotou. Ionty postupují do kolizní cely a jsou fragmentovány. Fragmentované ionty z kolizní cely prostupují do třetího kvadrupólu, který selektivně propouští pouze jeden fragment, který je detektorem zaznamenán.



Obrázek 16 Schéma trojitého kvadrupólu při skenu prekurzorových iontů. [44]

3. Sken neutrální ztráty

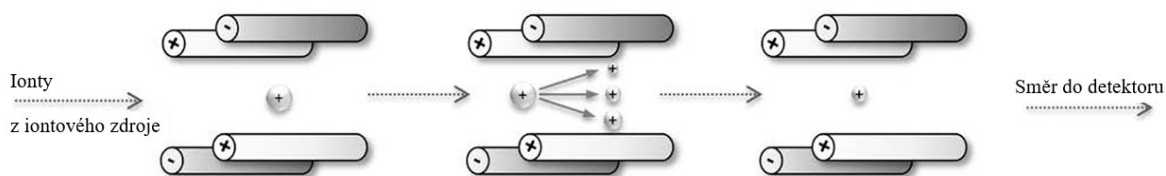
První i třetí kvadrupól sledují zároveň ionty s konstantní rozdíl hmotnosti iontu vůči náboji. Rozdíl vzniká v kolizní cele a odpovídá neutrálnímu fragmentu vzniklému při srážce



Obrázek 17: Schéma trojitého kvadrupólu při skenu neutrální ztráty [44]

4. Sledování rozpadu iontu

První kvadrupól funguje jako selektor pro iont prekurzoru, který v kolizní cele bude mít ideální fragmentaci. Třetí kvadrupól selektivně vybírá nejintenzivnější iont produktu kolizní fragmentace. Rozdíl hmotnosti iontu vůči náboji iontu prekurzoru a produktu je tzv. hmotnostní přechod, který je pro mnohé látky známou a velmi specifickou hodnotou. [44]



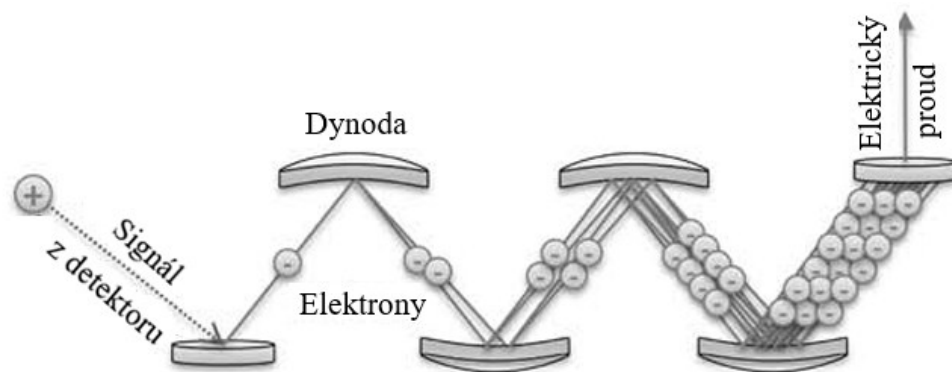
Obrázek 18 Schéma trojitého kvadrupólu při sledování rozpadu iontu [44]

2.3.5 Detektory

Hmotnostní analyzátor selektivně propouští ionty do detektoru, který při interferenci s iontem tvoří signál, který pak již vidíme na chromatogramu jako tzv. pík. Detektory je

možné rozdělit do dvou kategorií. Detektory schopné zaznamenávat příchozí ionty dle hmotnosti vůči náboji a detektory měřící přímo elektrický proud.

Do prvního typu patří iontově cyklotronová rezonance a orbitrap. Detektor detekuje ionty jako tzv. proudový obraz, tedy různé ionty i s jejich hmotnostmi vůči náboji. Signál je následně zpracován pomocí Fourierovy transformace. Druhý typ měří přímý elektrický proud, který vzniká při srážce iontu s dynodou. Vzniklý signál je zesilován pomocí elektronových násobičů. [44]



Obrázek 19 Schéma fungování dynodového násobiče elektronů [44]

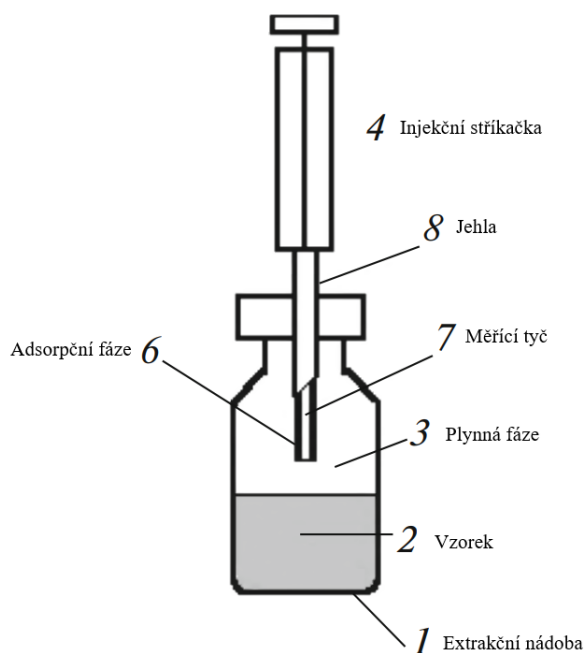
3 VYUŽITÍ (HS-SPME)-GC-MS V ANALÝZE POTRAVIN

3.1 Úvod

Moderní trend zelené chemické analýzy vedl k vývoji mikroměřítkových extrakčních metod. Jednou z takových metod je headspace mikroextrakce na tuhé fázi (HS-SPME). Výhodou dané metody je, že není potřeba příliš rozpouštědla nebo použití složité aparatury [45]. Metoda byla objevena v roce 1990 Arthurem a J. Pawliszem a byla používána původně k extrakci organického znečištění z vody. Postupem času se začala používat na matrice biologického charakteru. [46-47]

3.2 Mechanismus HS-SPME

Z anglického headspace neboli prostor nad vzorkem (2) je oblast, kde se nachází daný analyt v plynné fázi (3). Pro adsorpci analytu je typicky použita měřicí tyč (7), ve které je přibližně 1 cm dlouhé křemenné vlákno, na kterém je nanesený organický polymer (6). Při samotném měření je jehlou (8) propíchnuta extrakční nádoba (1), z jehly je vysunuta měřicí tyč s organickým polymerem (6) sloužícím jako sorbent a na něm dochází k adsorpci relativně malého množství analytu (3). Po 15-20 minutách dochází k rovnovážnému stavu plynná fáze – adsorpční fáze a adsorpce je u konce. [48]



Obrázek 20 Schéma mechanismu headspace [49]

3.2.1 Rychlost a množství adsorpce

Jak rychle adsorpce probíhá je pak ovlivněno třemi faktory:

1. Molekulová hmotnost
2. Množstvím a typem polymeru na vlákne
3. Koncentrace analytu ve vzorku [48]

Mezi počáteční a adsorbovanou koncentrací analytu je pak lineární vztah vyjádřen rovnicí:

$$n = \frac{K \cdot V_S \cdot C \cdot V_V}{K \cdot V_S + V_V}$$

kde n = množství analytu sorbovaného na adsorpční fázi

C = počáteční koncentrace analytu ve vzorku

K = rozdělovací koeficient pro analyt mezi adsorpční fázi a vzorkem

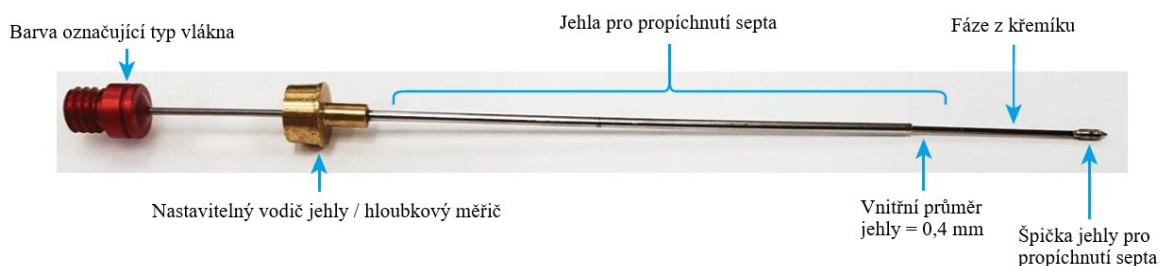
V_S = objem sorbentu

V_V = objem vzorku

Pomocí dané rovnice je možné kvantitativně stanovovat množství analytu např. v matrici biologické, v ovzduší nebo ve vodě. [50]

Typy polymerních vláken

SPME vlákno



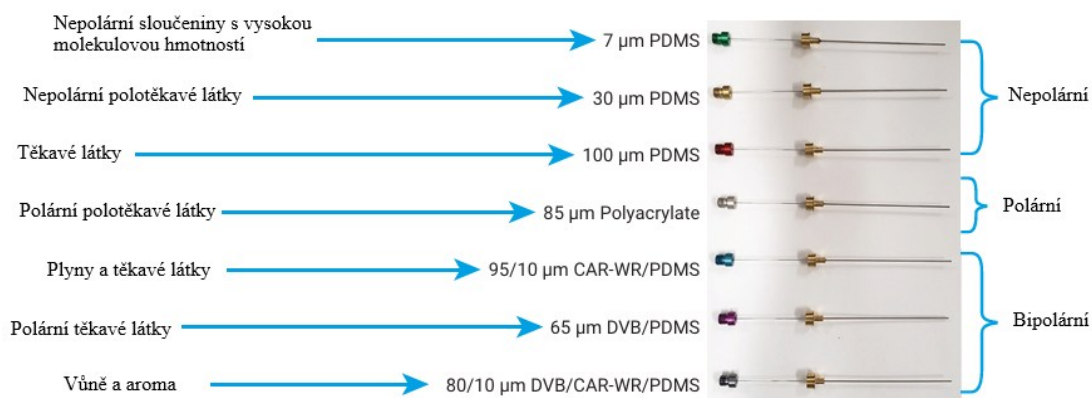
Obrázek 21 Charakteristika SPME vlákna [51]

Typ polymerního vlákna, který zvolíme pro analýzu, by měl odpovídat charakteru analytu. Tedy jeho polaritě, těkavosti a molekulární hmotnosti. Při správném zvolení vlákna je možné z matrice separovat a následně analyzovat látky o předem známých polaritách a těkavosti a

molekulární hmotnosti. Polymerní materiály, které se na nanáší na křemenné vlákno, jsou typicky:

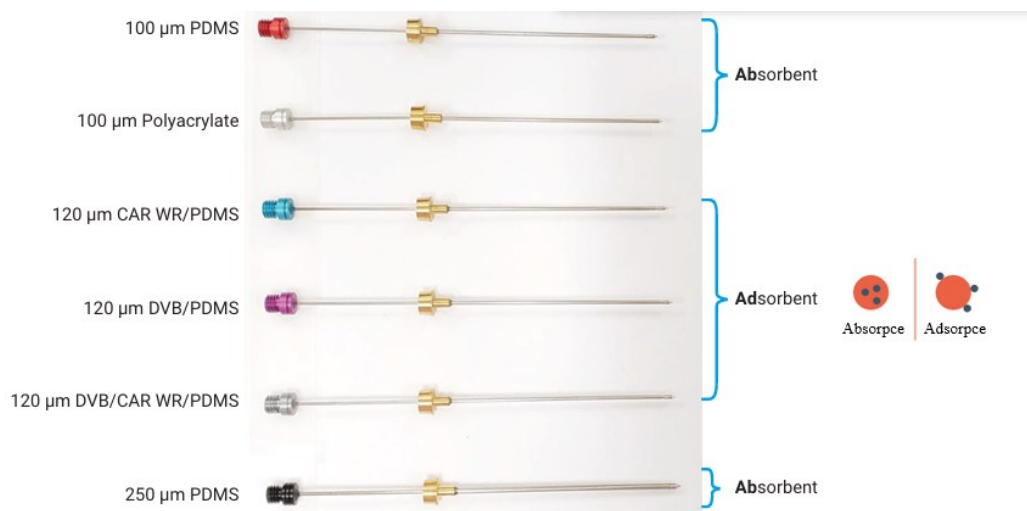
1. PDMS – polydimethylsiloxan
2. Polyacrylate
3. Carbon
4. DVB – Divinylbenzen
5. jejich kombinace (Carbon/PDMS, DVB/PDMS)

Polymerní materiály nanesené na vlákno se pak dají rozdělit, dle polarity a těkavosti viz Obrázek 22



Obrázek 22 Fáze vláken SPME a jejich přidružené polarity [51]

Nebo dle typu interakce s analyty na absorpční/adsorpční viz Obrázek 23



Obrázek 23 Fáze vláken SPME a jejich materiálové vlastnosti [51]

3.3 Využití (HS-SPME)-GC-MS v analýze potravin

HS-SPME v kombinaci s GC-MS je široce využívanou metodou pro analýzu těkavých aromatických sloučenin v potravinách, jako je například maso, víno, brambory, čaj, sýr a ovoce [52]. Díky velice vysoké separační a detekční schopnosti téhle analytické metody je možné měřit i složení velice složitých matric, jako jsou například koření. Metoda je vhodná i pro stanovování falšování koření typicky třeba šafránu, který je nejdražším kořením na světě. Pomocí matematických modelů je možné rozlišit falšovaný šafrán již při kontaminaci w 2 % [53].

3.3.1 Mléko

Těkavé aromatické látky značně ovlivňují kvalitu a senzorické vlastnosti mléka. Mléko je navíc typické svou schopností vázat a zadržovat cizí pachy. Současné metody zahrnující elektrický nos a jazyk nedokážou kvalitativně či kvantitativně stanovit tak široké spektrum, jako je spektrum těkavých látek v mléce. Při použití (HS-SPME)-GC-MS bylo rozpoznáno až 42 různých látek, které bylo možné kvantifikovat. Při použití plynové chromatografie společně s elektrickým nosem a elektrickým jazykem lze hledat korelace mezi složením těkavých aromatických látek v mléce a jejich vlivem na vůni a chuť [54].

3.3.2 Maso

Další využití je například v analýze těkavých aromatických látek v mase, které se tvoří během procesu vaření. Těkavé aromatické látky jsou produkovány převážně maillardovými reakcemi a oxidativními degradacemi lipidů a k jejich detekci se běžně používají elektrický nos a senzorické testování. Obě metody však mají své úskalí a není pomocí nich možné provádět kvalitativní či kvantitativní analýzu. (HS-SPME)-GC-MS v téhle oblasti poskytuje velice přesnou jak kvalitativní, tak kvantitativní analýzu [52].

3.3.3 Oleje

Extra panenský olivový olej dle evropských kritérií nesmí mít nežádoucí senzorické vady. Senzorické stanovení, je velice subjektivní a je těžko kvantifikovatelné. Ve studii zabývající se senzorickými látkami v olivovém oleji a jejich stanovením pomocí (HS-SPME)-GC-MS bylo dosaženo kvalitativního a kvantitativního stanovení 52 těkavých aromatických látek, na základě kterých je možné určit kvalitu daného oleje, dle standardu panenského olivového oleje [55].

II PRAKTICKÁ ČÁST

1 VYBAVENÍ

1.1 Přístroje a zařízení

Shimadzu GCMS-TQ8040 NX – plynový chromatograf s trojitým kvadrupólovým hmotnostním spektrometrem, iontovým zdrojem, vysokovýkonným kolizním článkem (UFSweeper™), pokročilým řízením průtoku helia a teploty (Nexis™ GC-2030), a patentovanou technologií kontroly elektrického pole pro přesné rozlišení hmotnosti. dávkování vzorků AOC-6000 Plus. Kapilární kolona Shimadzu SH-I-1MS.

Shimadzu Smart SPME Fibers Acrylate - 85 µm, DVB/Carbon WR/PDMS - 80 µm

Headspace vialky Shimadzu 20 ml sklo, čiré; 18 mm přesný šroubový závit; kulaté dno; 75,50 x 22,5 mm, magnetická krytka 8 mm se středovým otvorem; silikon modrý transparentní/PTFE bílý; UltraClean; tloušťka 1,3 mm; tvrdost 45° podle stupnice Shore A

2 METODY ANALÝZY

2.1 Vzorky

1. Wolfberry Kurkuma mletá BIO 50 g, složení: Mleté oddenky Kurkumy BIO 100 % od dodavatele Wolfberry s.r.o., Bohunická 187/5, Brno - Horní Heršpice, PSČ 619 00. Dále jen jako kurkuma BIO
2. Kurkuma mletá 30 g, od výrobce Ramdam s.r.o. Příkop 843/4, 602 00 Brno. Dále jen jako kurkuma sušená.
3. Kurkuma čerstvá, země původu Indie, dodavatel Chaudary Food Traders Sp. z o Ul.Domaniewska 22/5 02-672, Varšava 02-672. Dále jen jako kurkuma čerstvá

2.2 Příprava vzorků

Vzorky kurkumy BIO a sušené byly umístěny do headspace vialek v množství 0,025; 0,05 a 0,1 g. U kurkumy čerstvé bylo množství 0,1; 0,2 a 0,3 g. Současně byly připraveny obdobné vzorky, ale s přidavkem 2 ml nasyceného roztoku NaCl. Vialky byly ihned uzavřeny pomocí šroubového závitu. Jako vzorky pro měření pozadí byly použity prázdné vialky. Nakonec byla zvolena množství 0,050 g u kurkumy BIO a sušené a 0,1 g u vzorků kurkumy čerstvé. Použití nasyceného roztoku NaCl se ukázalo jako neefektivní a lepších nebo obdobných výsledků bylo dosaženo bez jeho použití.

2.3 Metoda GC

Teplotní program 1

Režim vstřikování: Splitový režim (5:1)

Teplota injektoru: 240 °C

Tabulka 2: Nastavení teplotního programu 1 GC

Tempo [°C/min]	Teplota [°C]	Doba držení teploty [min]
-	40	2
2	65	0
0,5	70	0
2	80	0
5	100	0
0,5	114	0
2	120	0
5	184	0
20	240	9,9

Nastavení hmotnostního detektoru

Teplota iontového zdroje: 230.00 °C

Teplota rozhraní: 280.00 °C

Čas odstranění rozpouštědla: 3 min

Čas začátku detekce: 3,05 min

Čas konce detekce: 89,99 min

Režim akvizice: Q3 Scan

Délka skenu: 0,050 s

Rychlost skenování: 20000

Dolní mez m/z: 40,00

Horní mez m/z: 550,00

Teplotní program 2

Režim vstřikování: Splitový režim (10:1)

Teplota injektoru: 230 °C

Tabulka 3: Nastavení teplotního programu 2 GC

Tempo [°C/min]	Teplota [°C]	Doba držení teploty [min]
-	50	5
20	150	0
5	230	4

Nastavení hmotnostního detektoru

Teplota iontového zdroje: 200.00 °C

Teplota rozhraní: 250.00 °C

Čas odstranění rozpouštědla: 3 min

Čas začátku detekce: 3,05 min

Čas konce detekce: 29,99 min

Režim akvizice: Q3 Scan

Délka skenu: 0,050 s

Rychlost skenování: 20000

Dolní mez m/z: 40,00

Horní mez m/z: 550,00

2.4 Parametry SPME vláken

DVB/Carbon WR/PDMS - 80 µm

Teplota kondicionování: 240 °C

Doba předkondicionování: 30 min

Teplota inkubace: 45 °C

Doba inkubace: 20 min

Doba extrakce vzorku: 10 min

Doba desorpce vzorku: 3 min

Doba postkondicionování: 5 min

Acrylate - 85 μm

Teplota kondicionování: 240 °C

Doba předkondicionování: 30 min

Teplota inkubace: 45 °C

Doba inkubace: 20 min

Doba extrakce vzorku: 10 min

Doba desorpce vzorku: 3 min

Doba postkondicionování: 5 min

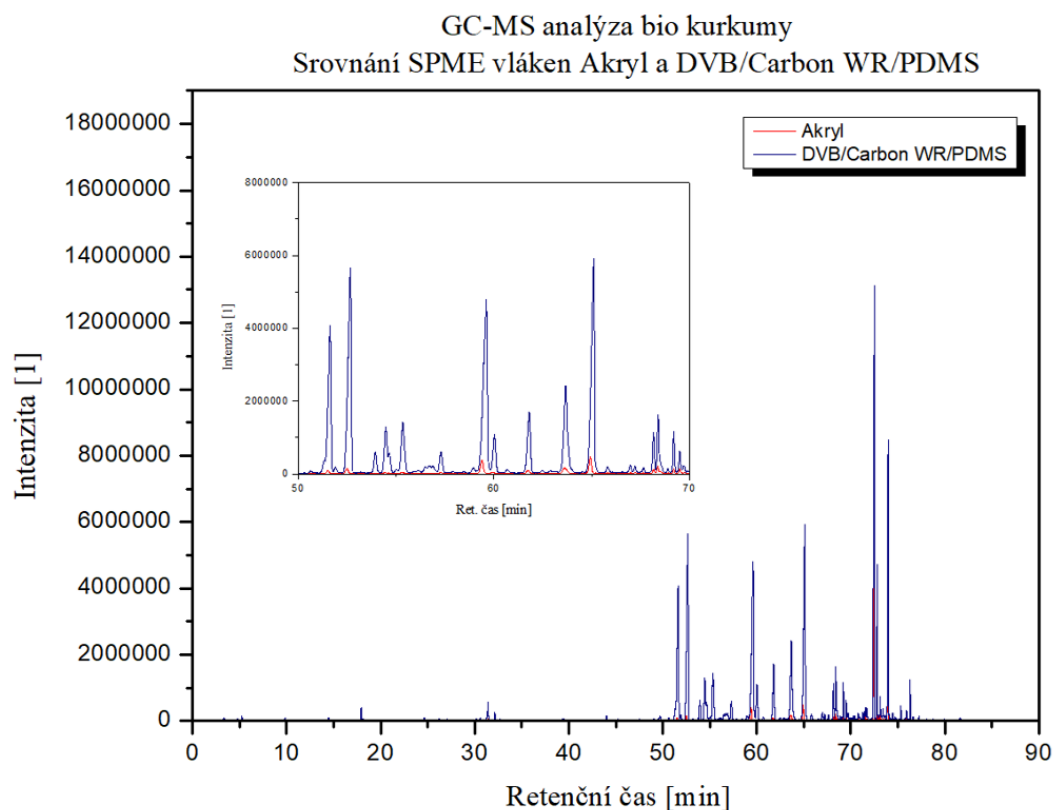
3 VYSLEDKY A DISKUZE

3.1 Optimalizace vláken

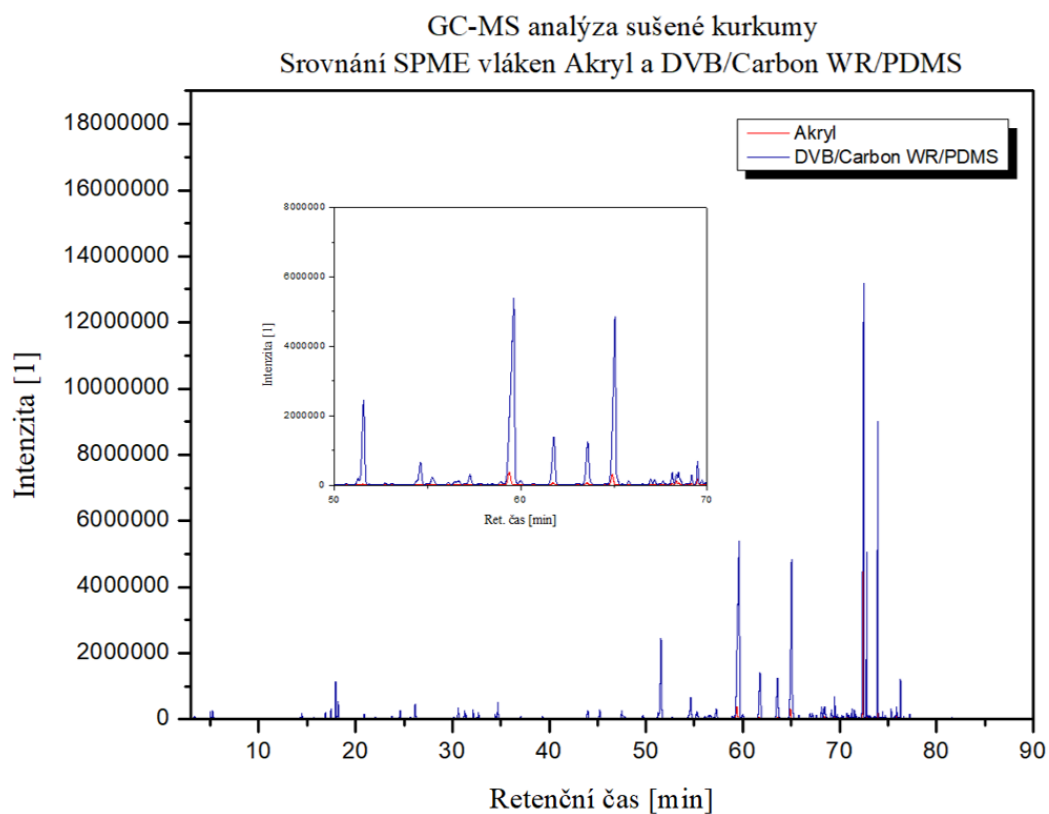
Pro měření byly zvoleny dva typy vláken:

1. Acrylate - 85 μm
2. DVB/Carbon WR/PDMS - 80 μm

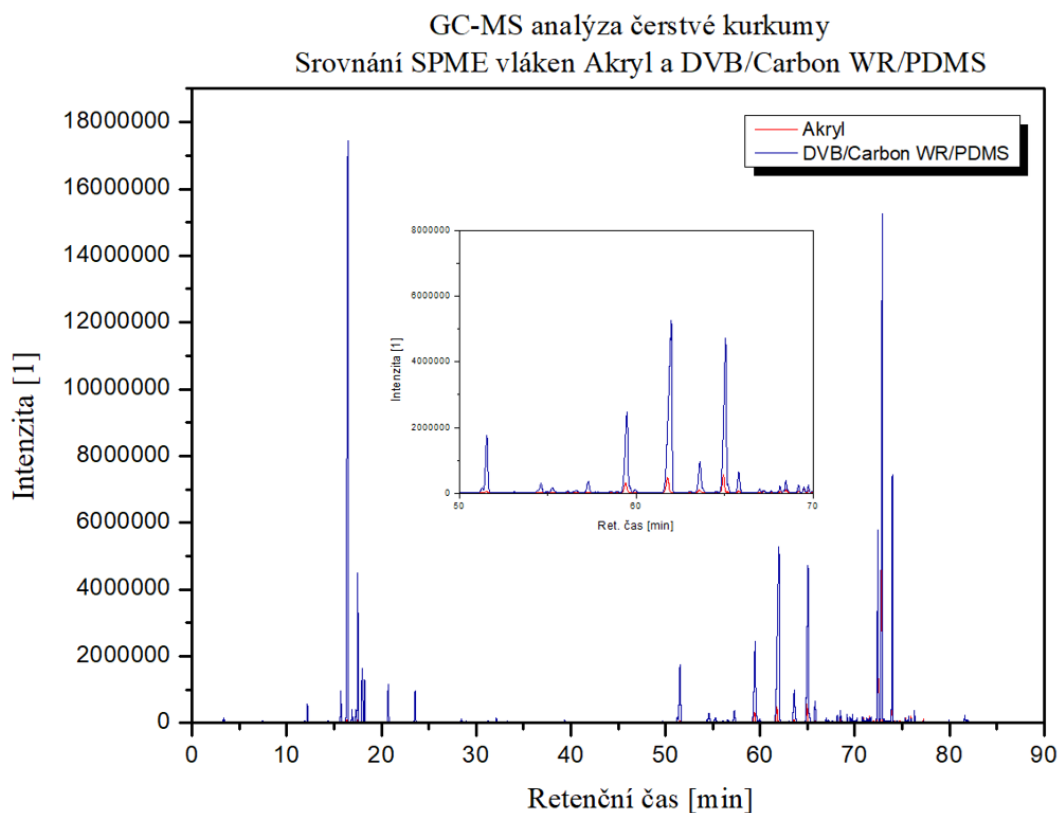
Akrylové vlákno bylo zvoleno na základě článku [56], kde jej autoři srovnávali s vláknem polydimetylsiloxanovým (PDMS) a kde vlákno akrylové shledali, jako vlákno vhodnější pro analýzu kurkumy. Při naší analýze kurkumy se akrylové vlákno v analýze neosvědčilo a zvolili jsme k měření vlákno divinilbenzen-carbon-polidimetylsiloxanové (DVB/Carbon WR/PDMS), které jsme se rozhodli použít na základě článku [53]. Při srovnání akrylového vlákna s vláknem divinilbenzen-carbon-polidimetylsiloxanovým jsme došli k výsledku, že použití divinilbenzen-carbon-polidimetylsiloxanového vlákna, vede k většímu množství a intenzitě píků viz Grafy 1-3.



Graf 1: Srovnání akrylového a DVB/Carbon WR/PDMS vlákna při analýze bio kurkumy



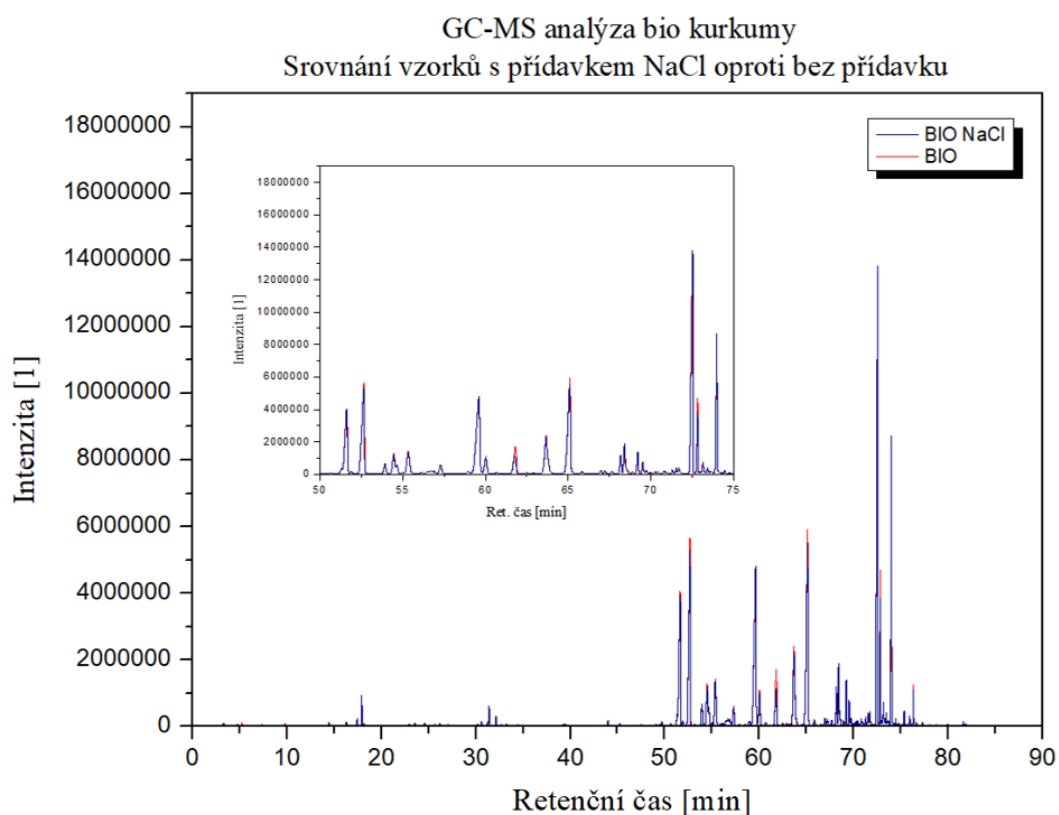
Graf 2: Srovnání akrylového a DVB/Carbon WR/PDMS vlákna při analýze sušené kurkumy



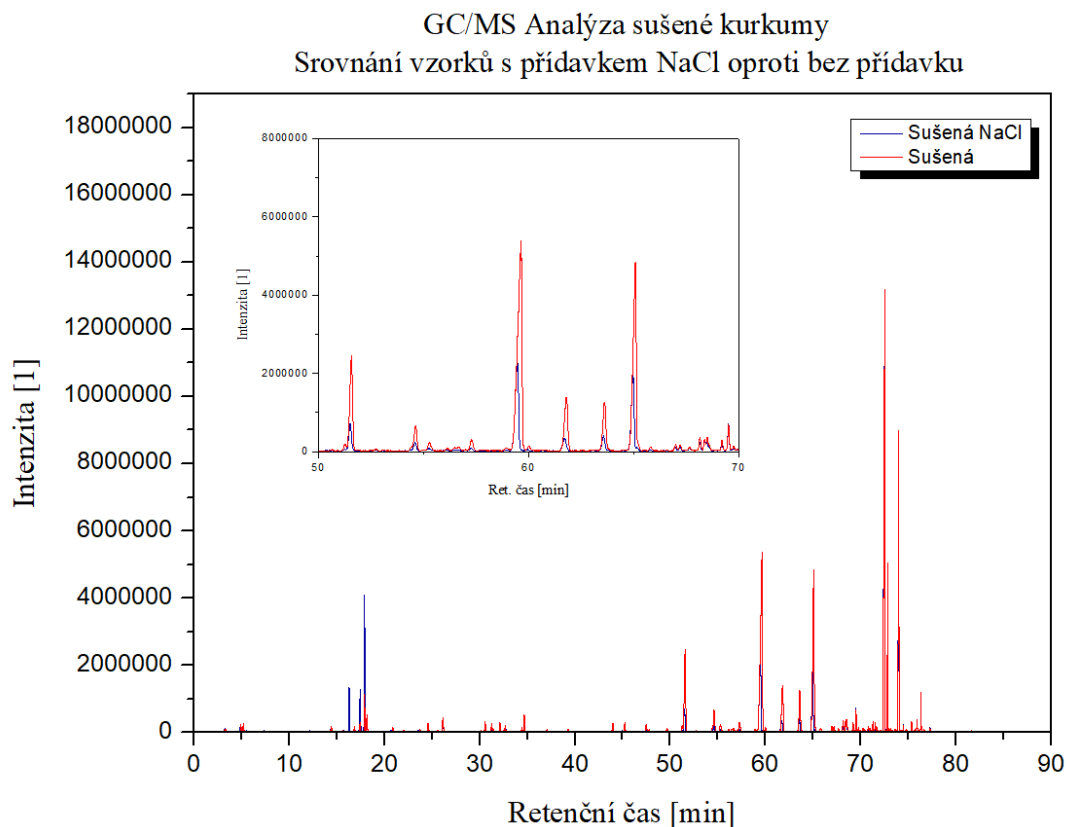
Graf 3: Srovnání akrylového a DVB/Carbon WR/PDMS vlákna při analýze čerstvé kurkumy

3.2 Optimalizace vzorkování – Přídavek NaCl

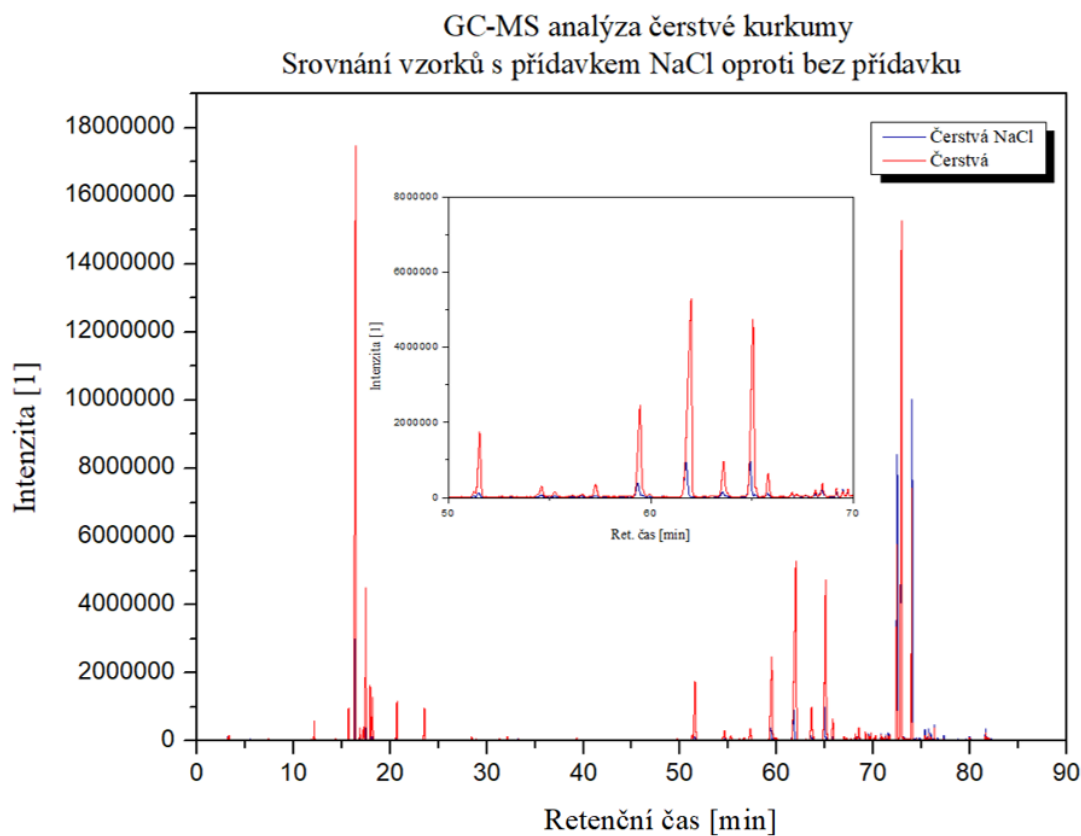
Dle článku [53] jsme vzorky zkusili připravit s přídavkem 2 ml nasyceného roztoku NaCl, kde autoři uváděli, že dosahovali lepších výsledků s takto upravenými vzorky. Při srovnání vzorků s přídavkem NaCl a bez přídavku jsme došli k závěru, že nasycený roztok soli nemá nějak značný vliv na intenzitu či množství píků a spíše mírně snižuje jejich intenzitu viz Grafy 5 a 6. U Grafu 4 byly rozdíly ve chromatogramech zanedbatelné. Hmotnostní spektra, byla prakticky totožná a nasycený roztok NaCl měl vliv pouze na intenzity píků. Na základě daných poznatků jsme zvolili pro analýzu vzorky bez přídavku NaCl.



Graf 4: Srovnání vzorků biokurkumy s přídavkem NaCl a bez přídavku



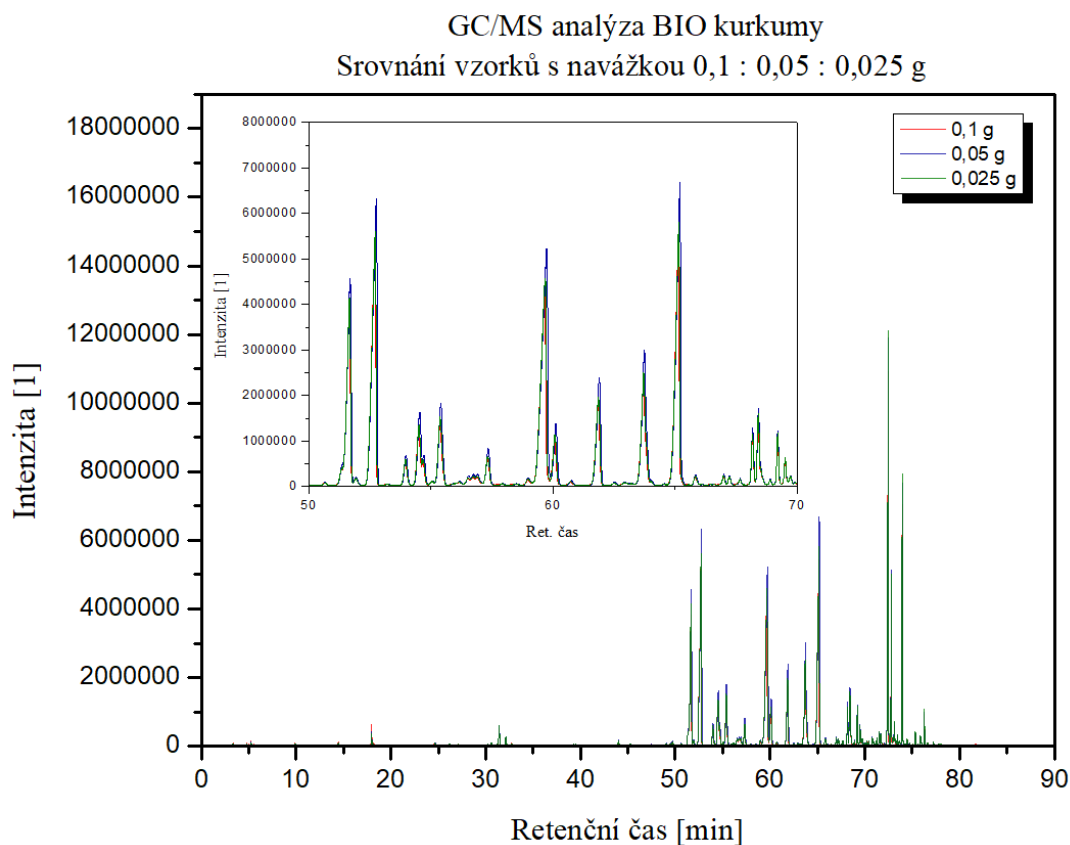
Graf 5: Srovnání vzorků sušené kurkumy s přídavkem NaCl a bez přídavku



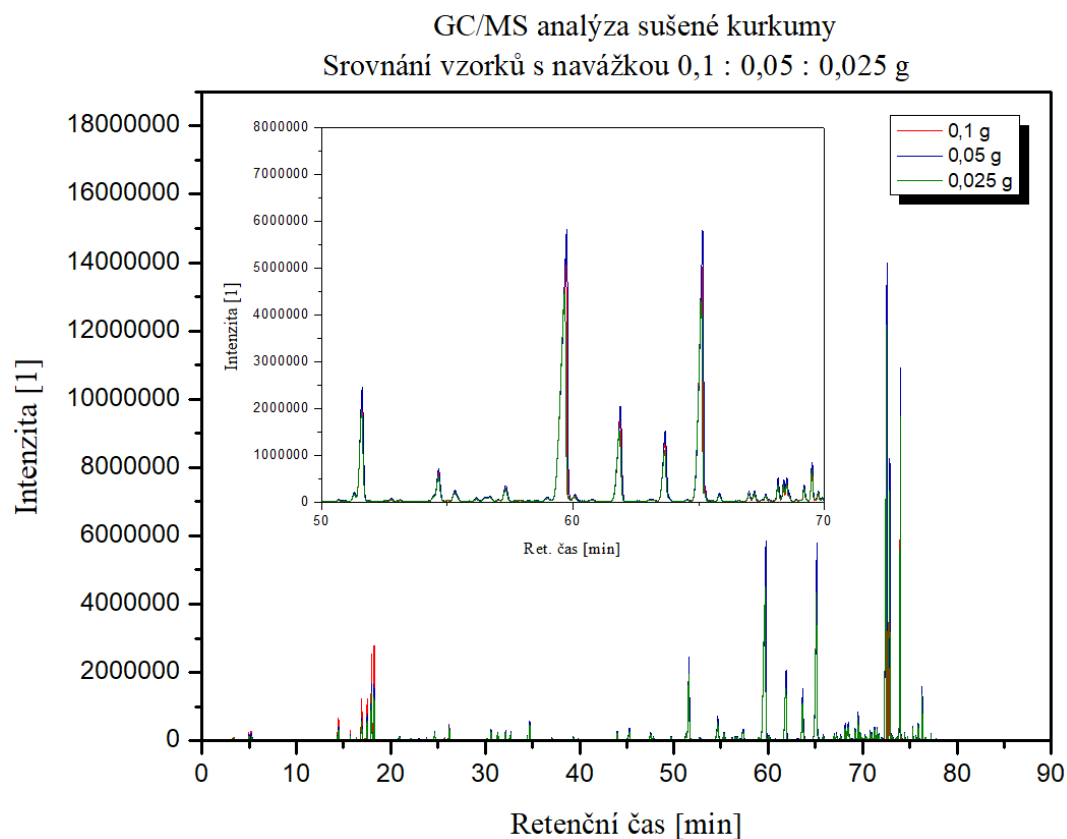
Graf 6: Srovnání vzorků čerstvé kurkumy s přídavkem NaCl a bez přídavku

3.3 Optimalizace vzorkování – Navážka

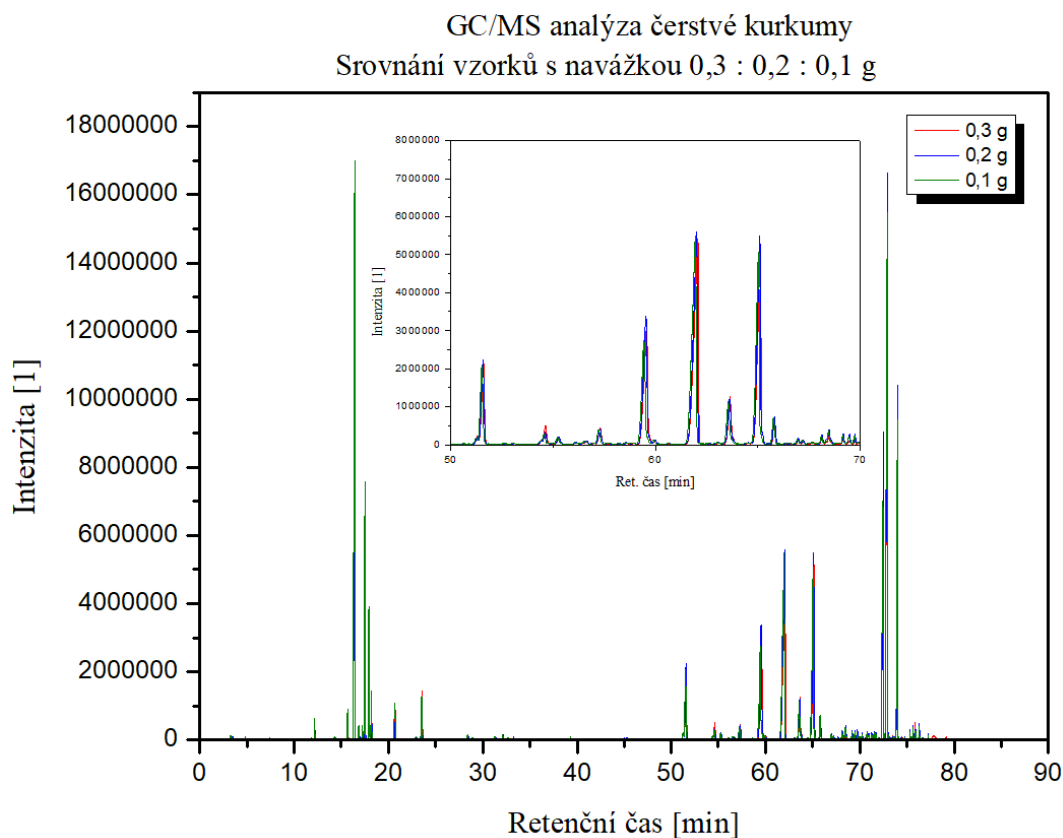
Navážka vzorků BIO a sušené kurkumy byla pro optimalizaci zvolena 0,1; 0,05 a 0,025 g. Pro vzorky čerstvé kurkumy byla zvolena navážka 0,1; 0,2 a 0,3 g kvůli vysokému obsahu vody, a tudíž nižšímu podílu sušiny. Navážky vycházely z článku [53], kde autoři uváděli, že množství 0,05 g bylo dle jejich analýzy nejvhodnější. Dle Grafů 7 a 8 jsme došli k závěru, že množství vzorku 0,05 g je skutečně nejvhodnější, jelikož u jak vyššího, tak nižšího množství byly intenzity píků o něco menší. U kurkumy čerstvé, kde navážky byly zvoleny po logické úvaze ohledně sušiny, jsme došli k závěru, že ve zvoleném rozmezí nemělo množství vzorku nějak značný vliv na intenzity píků viz Graf 9.



Graf 7: Srovnání vzorků bio kurkumy – navážka 0.1/0,05/0,025 g



Graf 8: Srovnání vzorků sušené kurkumy – navážka 0,1/0,05/0,025 g

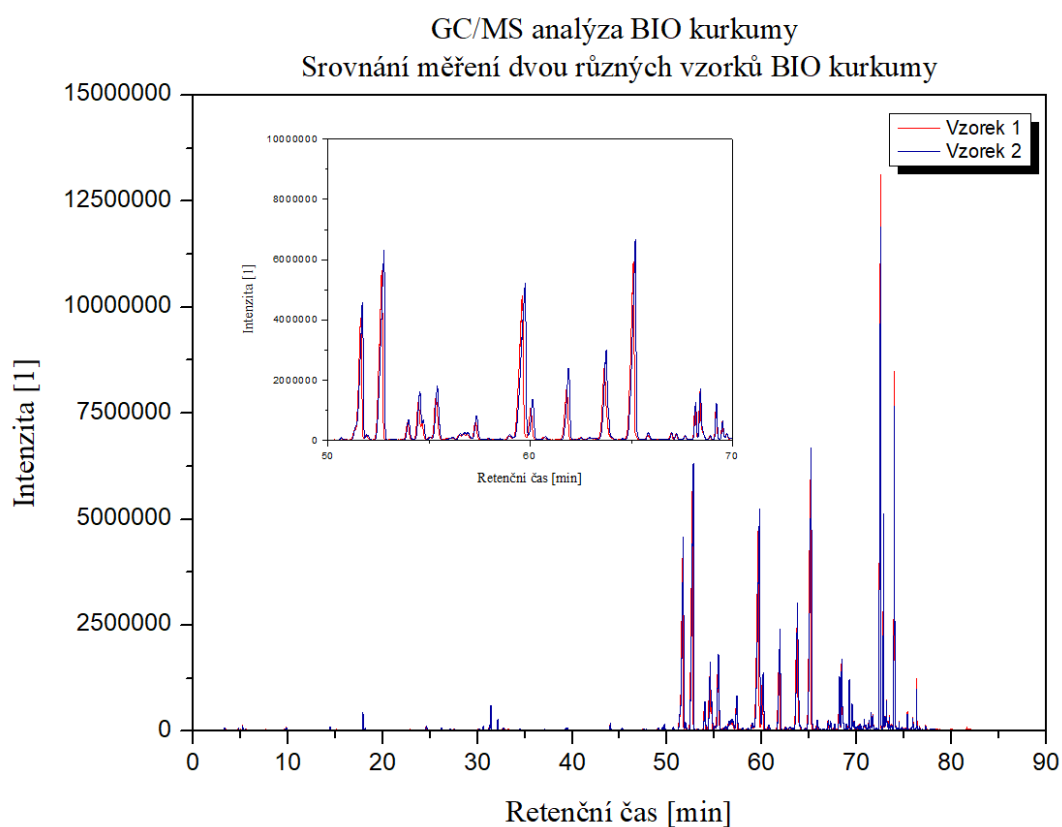


Graf 9: Srovnání vzorků čerstvé kurkumy – navážka 0,3/0,2/0,1 g

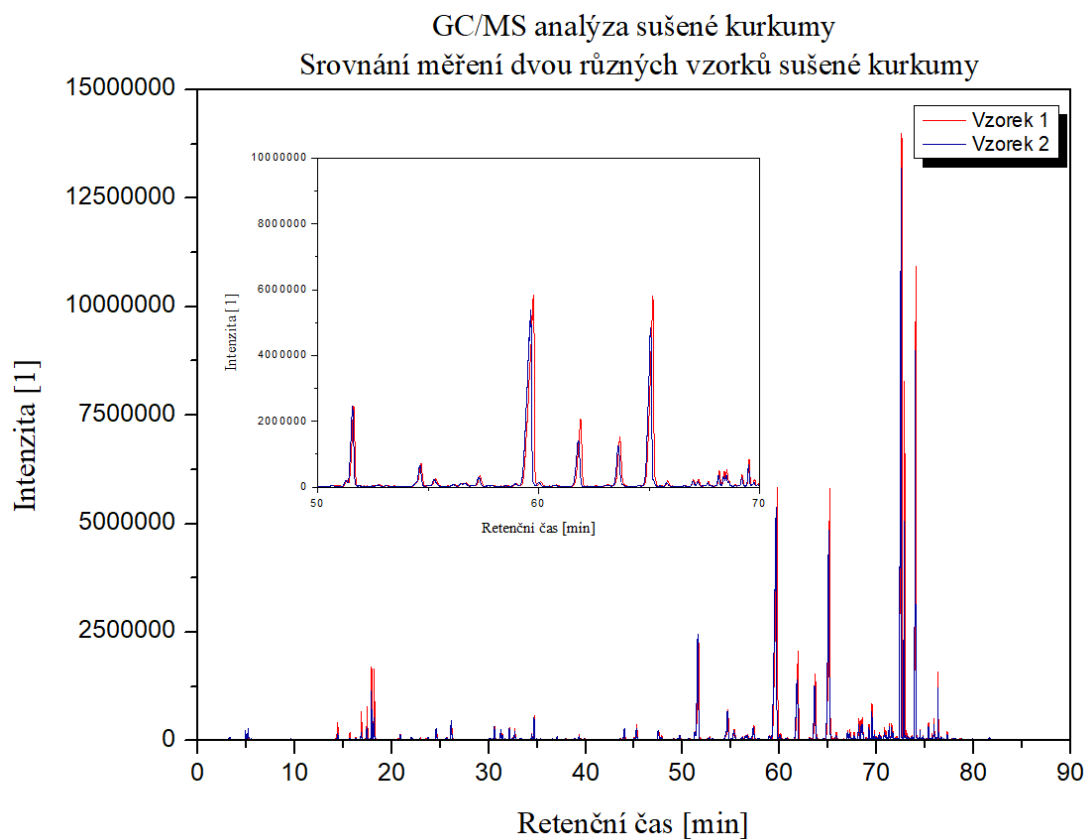
3.4 Optimalizace teplotního modelu

3.4.1 Teplotní program 1

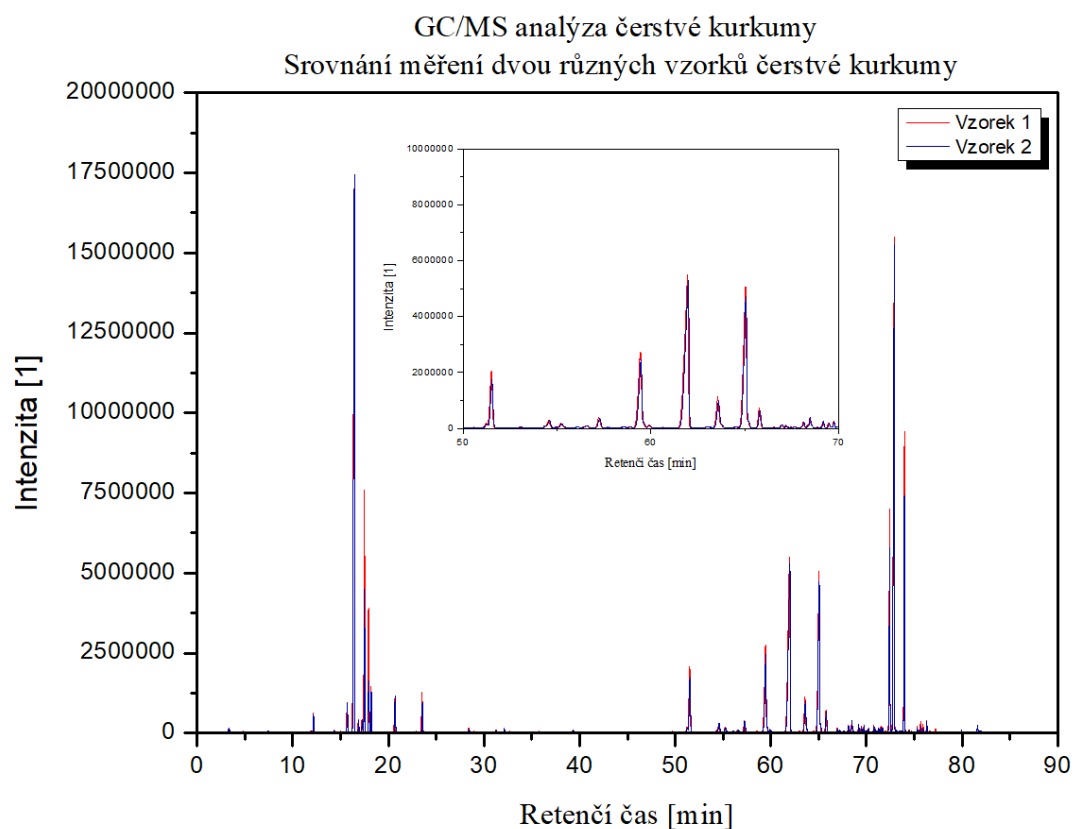
U teplotního programu 1 jsme vycházeli z článku [53], kde autoři měli program určený k analýze širšího množství vzorků, a proto tedy i samotná metoda je delší a teplotně pomaleji eskalující, než teplotní program 2. Při použití daného teplotního modelu byly prakticky zanedbatelné rozdíly, mezi jednotlivými měřeními stejného typu vzorku, a tedy dobrá reprodukovatelnost měření. Intenzity píků byly značné oproti šumu a separace látek byla ve většině případů dostačující, retenční časy analytů se téměř nepřekrývaly viz Grafy 10-12.



Graf 10: Srovnání vzorků BIO kurkumy – Teplotní program 1



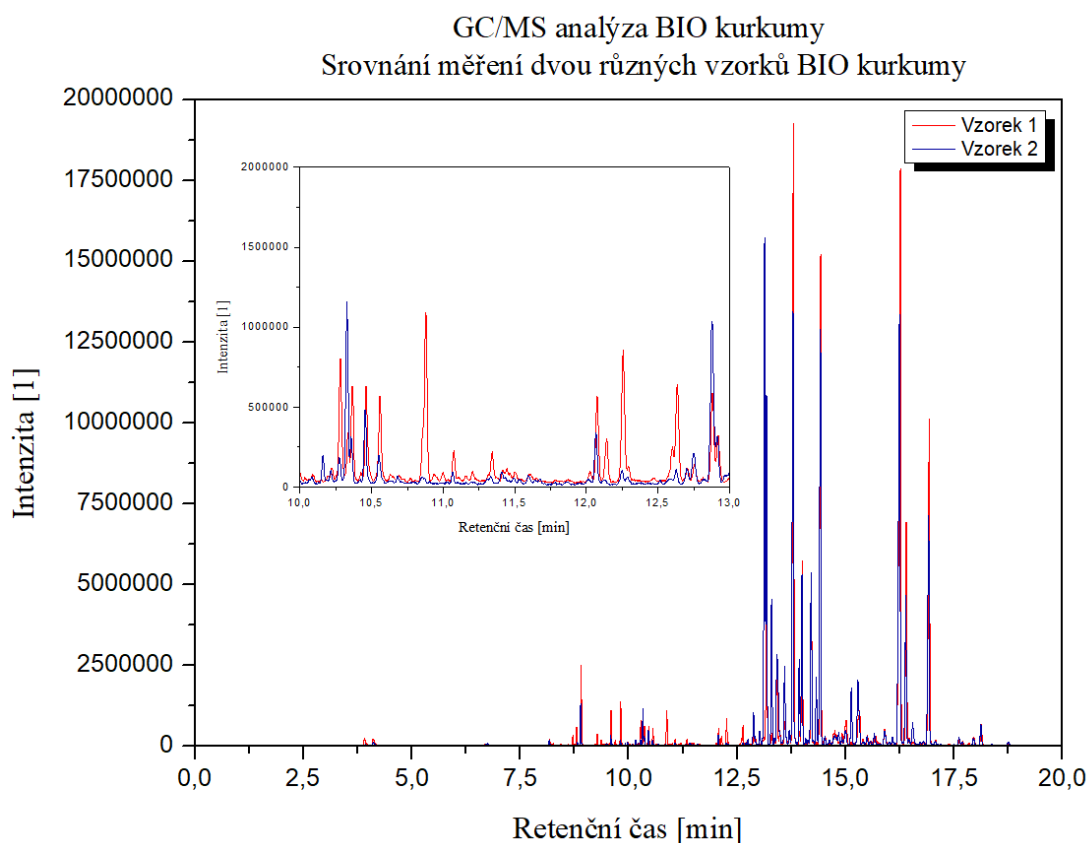
Graf 11: Srovnání vzorků sušené kurkumy – Teplotní program 1



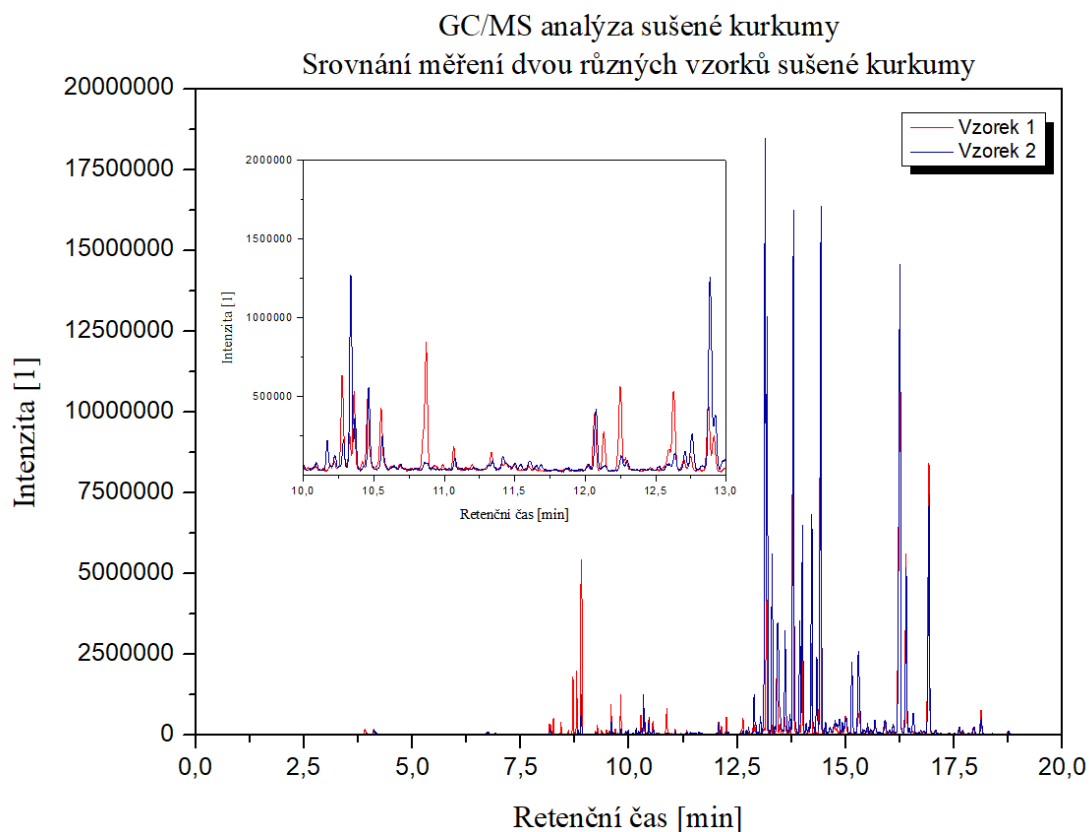
Graf 12: Srovnání vzorků čerstvé kurkumy – Teplotní program 1

3.4.2 Teplotní program 2

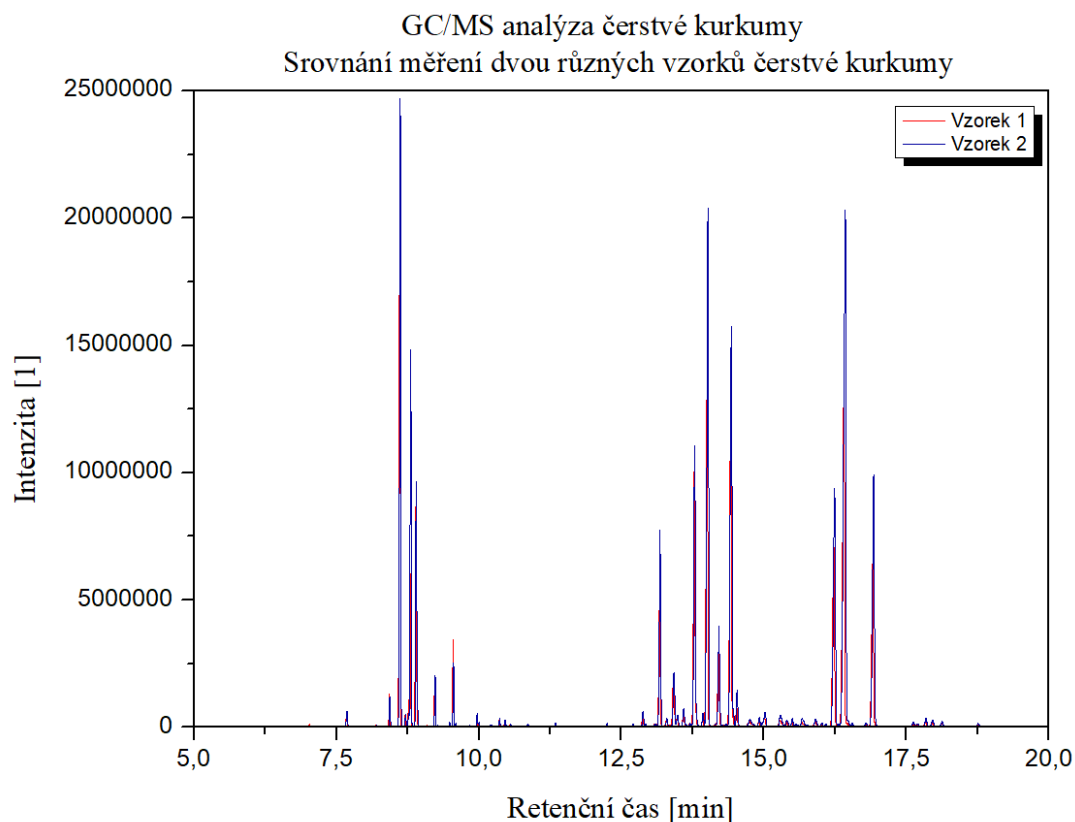
U teplotního programu 2 jsme vycházeli z článku [56], kde autoři měli program určený přímo k analýze kurkumy. Při použití daného teplotního modelu byly intenzity píků o něco vyšší než u modelu 1, ale reprodukovatelnost měření byla signifikantně nižší, avšak pro analýzu majoritních složek kurkumy by teplotní model byl stále vhodný. Problém se vyskytoval u složek minoritních, kde při dvou po sobě jdoucích měření některé látky měly mnohem nižší intenzity píků, nebo se dokonce v chromatogramu vůbec nevyskytovaly. Na základě daných poznatků o teplotních modelech byl zvolen Teplotní program 1.



Graf 13: Srovnání vzorků BIO kurkumy – Teplotní program 2



Graf 14: Srovnání vzorků sušené kurkumy – Teplotní program 2



Graf 15: Srovnání vzorků čerstvé kurkumy – Teplotní program 2

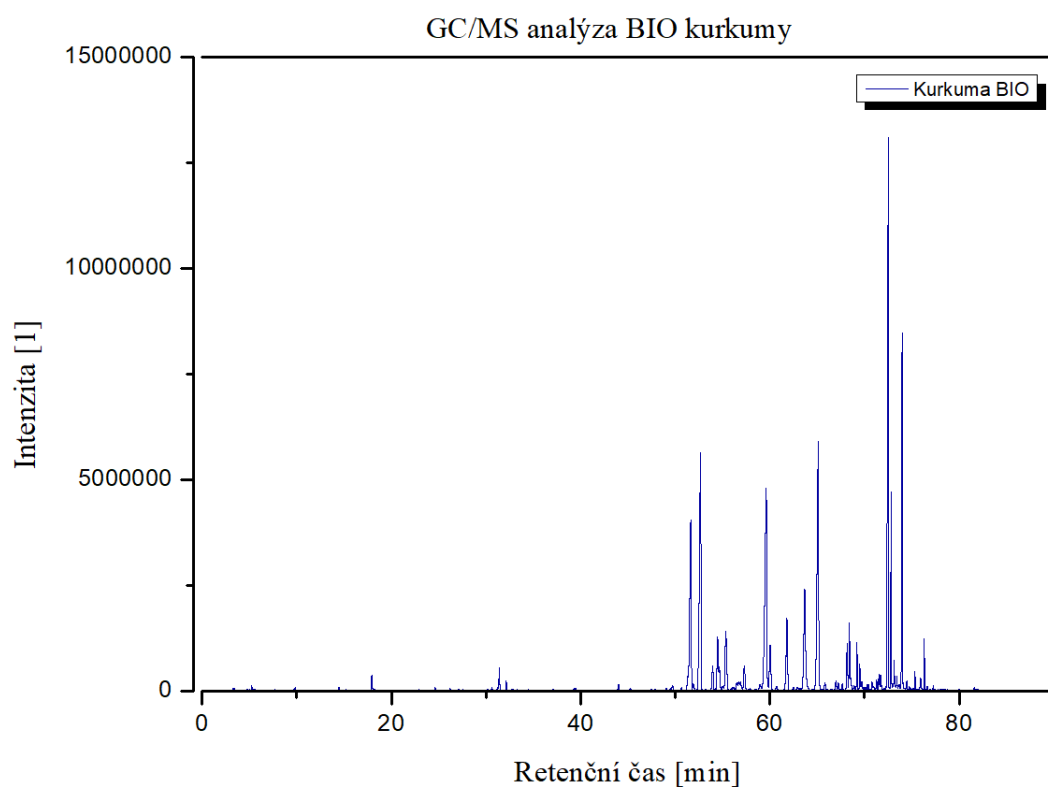
3.5 Analýza BIO kurkumy

Při analýze BIO kurkumy bylo stanoveno celkem 28 látek. Majoritními složkami byly viz Tabulka 4.

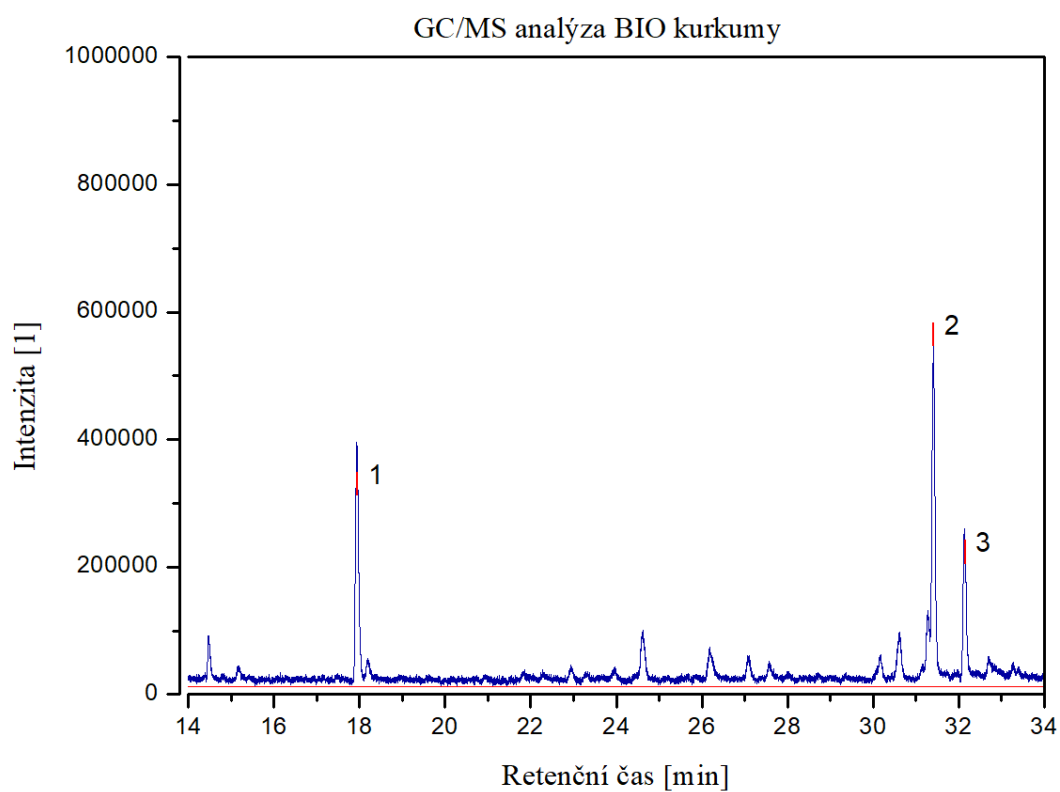
Tabulka 4: Majoritní složky BIO kurkumy stanovené pomocí HS-SPME-GC/MS

Název sloučeniny	Obsah v BIO kurkumě [%]	Pík
Ar-Turmeron	15,30	22
Ar-Kurkumen	13,34	10
Seskvisabinen B	12,84	14
α -Santalene	12,67	5
Karyofylen	9,04	4
Kurlon	6,37	26 a 20
β -Bisabolen	6,12	13
Zingiberen	3,94	12
Turmeron	3,82	23
trans- α -Bergamoten	3,19	7
cis- α -Bisabolen	3,15	8

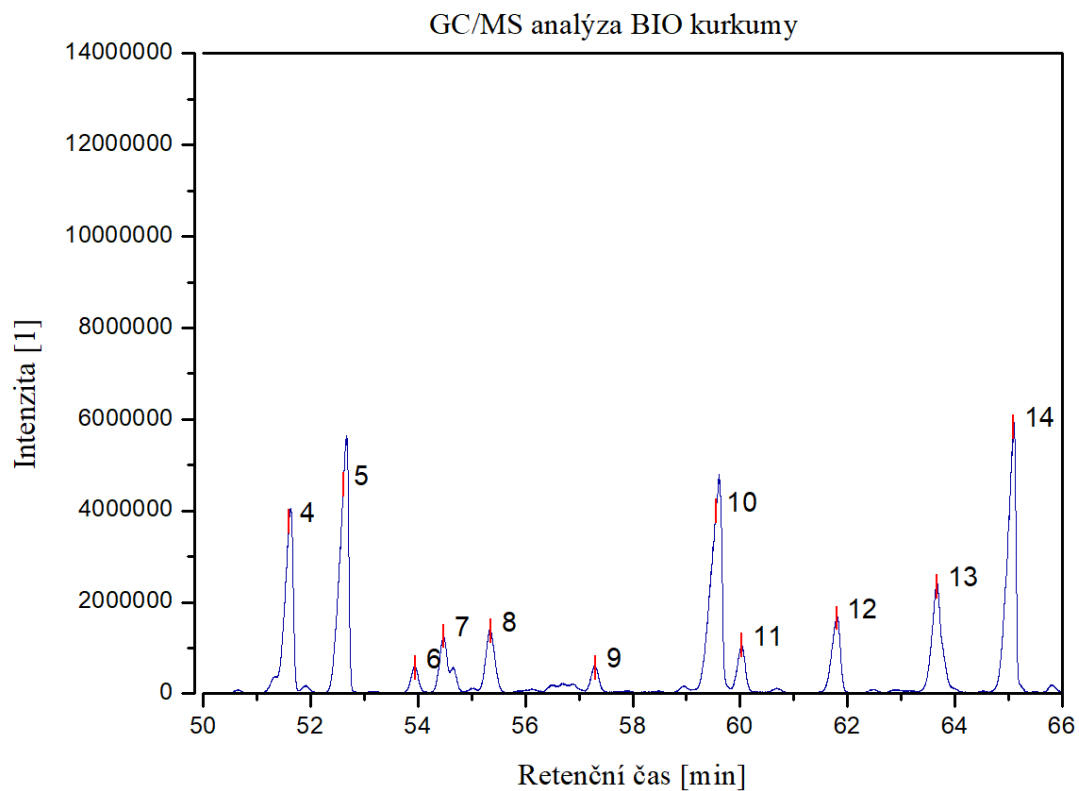
Celkový obsah majoritních složek činil 89,68 %. Jejich retenční časy, jsou zaznačené viz Tabulka 5 společně s hodnotou plochy píku v %, absolutní hodnotou plochy píku a SI (similarity index), který udává shodu hmotnostního spektra analytu s knihovnou spekter. Vyznačené retenční píky můžeme vidět na Grafech 17-19. Strukturní vzorce sloučenin jsou zaznačeny v tabulce 10.



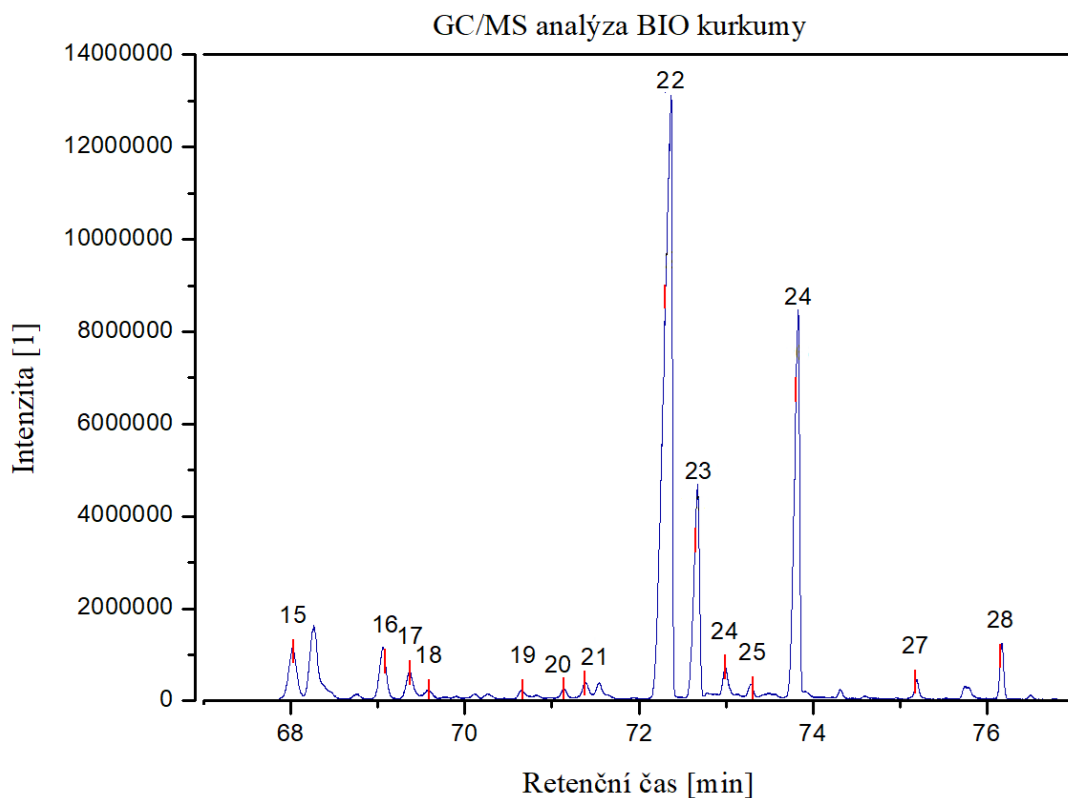
Graf 16: Chromatogram analýzy BIO kurkumy



Graf 17: Chromatogram (14-34) analýzy BIO kurkumy s vyznačenými píky



Graf 18: Chromatogram (50-66) analýzy BIO kurkumy s vyznačenými píky



Graf 19: Chromatogram (67-77) analýzy BIO kurkumy s vyznačenými píky

Tabulka 5: Seznam analyzovaných látek v BIO kurkumě s názvem sloučeniny retenčním časem, relativní plochou píku (area %), absolutní plochou píku (area) a procentuální shodou hmotnostního spektra s knihovnou spekter (SI-similarity index)

Peak#	Název sloučeniny	Retenční čas [min]	Plocha [%]	Plocha	SI
1	Eukalyptol	17.95	0.37	2 102 508	96
2	p-Cymen-8-ol	31.41	0.55	3 153 802	94
3	α -terpineol	32.14	0.19	1 096 738	94
4	Karyofylen	51.67	9.04	51 650	96
5	α -Santalene	52.71	12.67	72 605	93
6	Teresantalol	53.96	0.98	5 592 104	87
7	trans- α -Bergamoten	54.52	3.19	18 229	87
8	cis- α -Bisabolen	55.38	3.15	18 056	87
9	cis- β -Farnesen	57.32	1.17	6 766 563	92
10	α -Kurcumen	59.68	13.34	76 700	90
11	β -Seskvisabinen	60.07	1.99	11 445	93
12	Zingiberen	61.84	3.94	22 608	96
13	β -Bisabolen	63.71	6.12	35 035	91
14	Seskvisabinen B	65.16	12.84	73 512	94
15	Karyofylenoxid	68.16	1.24	7 076 387	89
16	(E)- γ -Atlantone	69.20	1.08	5 804 169	87
17	Benzene, 1-metyl-4-(1-metylpropyl)	69.50	0.53	3 033 460	85
18	Humulene-1,2-epoxid	69.72	0.19	1 091 776	85
19	Zingiberenol	70.79	0.19	1 085 853	91
20	Kurlon	71.27	0.15	888 214	86
21	Bergamotol, Z- α -trans-	71.52	0.28	1 600 357	78
22	Ar-Turmeron	72.51	15.30	86 602	93
23	Turmeron	72.81	3.82	21 966	91
24	β -Bisabolol	73.13	0.42	2 400 288	93
25	Germacron	73.42	0.17	974 566	93
26	Kurlon	73.97	6.22	35 097	96
27	(6R,7R)-Bisabolon	75.32	0.26	1 417 066	94
28	(E)-Atlanton	76.30	0.57	3 214 894	93

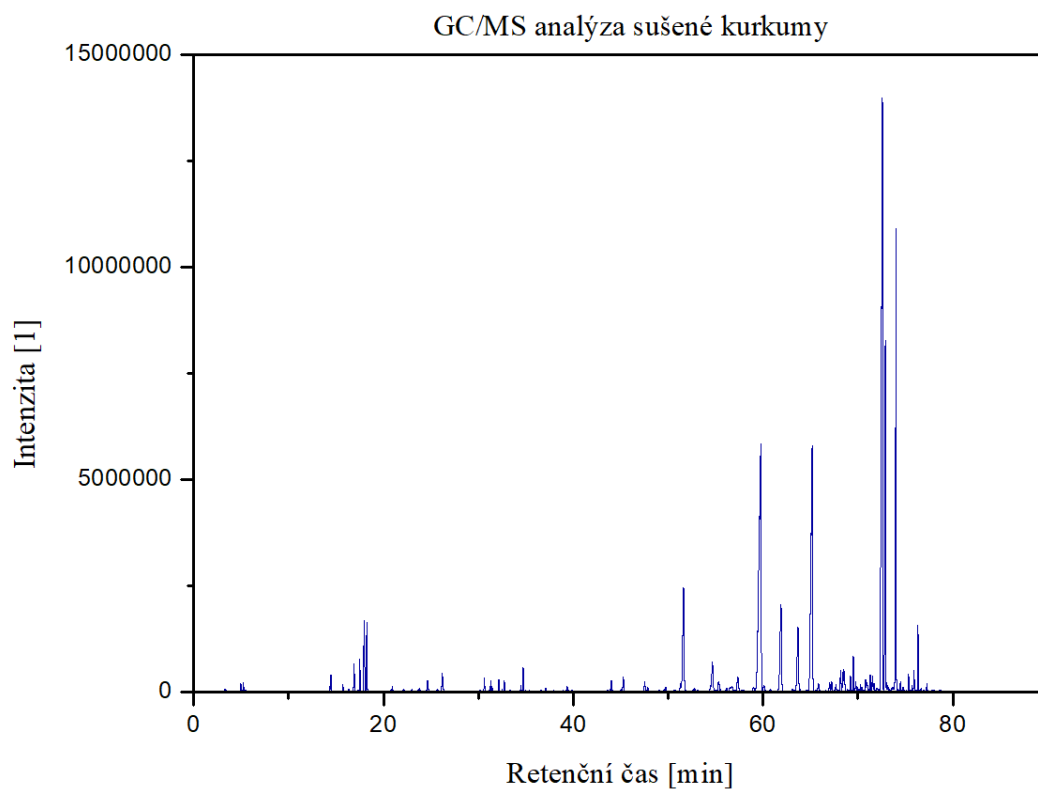
3.6 Analýza sušené kurkumy

Při analýze sušené kurkumy bylo stanoveno celkem 41 látek. Majoritními složkami byly viz Tabulka 6.

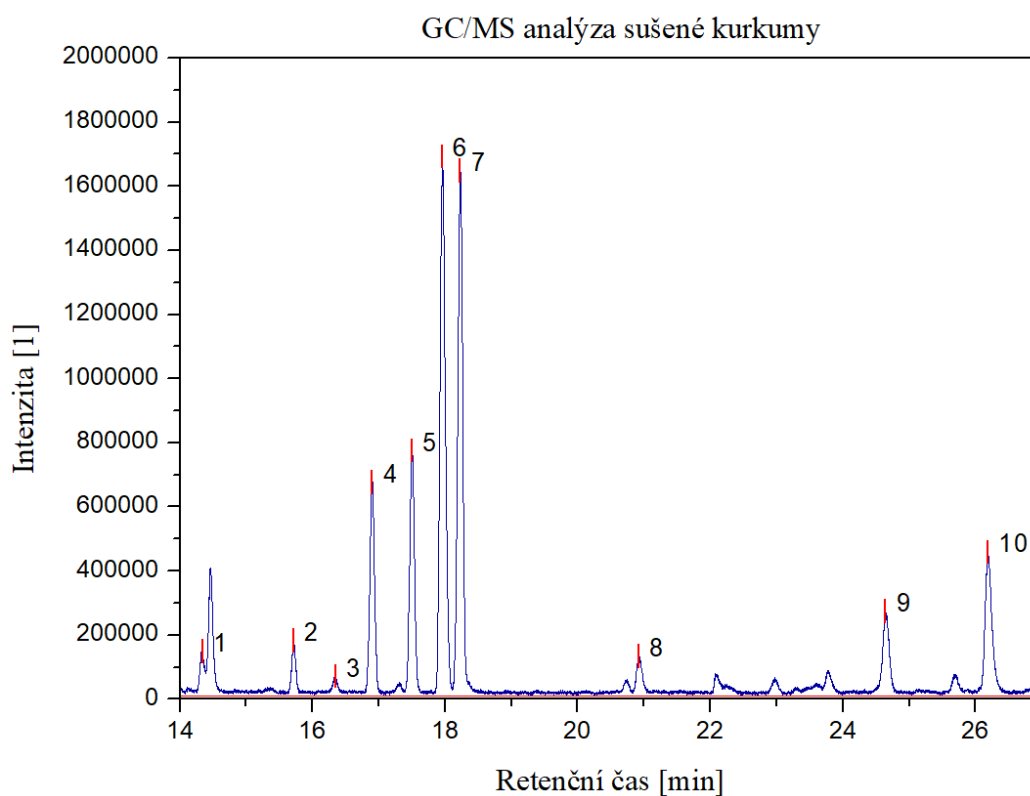
Tabulka 6: Majoritní složky sušené kurkumy stanovené pomocí HS-SPME-GC/MS

Název sloučeniny	Obsah v sušené kurkumě [%]	Pík
Ar-Turmeron	23,11	36
α -Kurkumen	18,94	24
Seskvisabinen B	13,06	27
Kurlon	10,57	38
Turmeron	6,23	37
Caryofylen	5,51	20
Zingiberen	4,24	25
β -Bisabolen	3,14	26

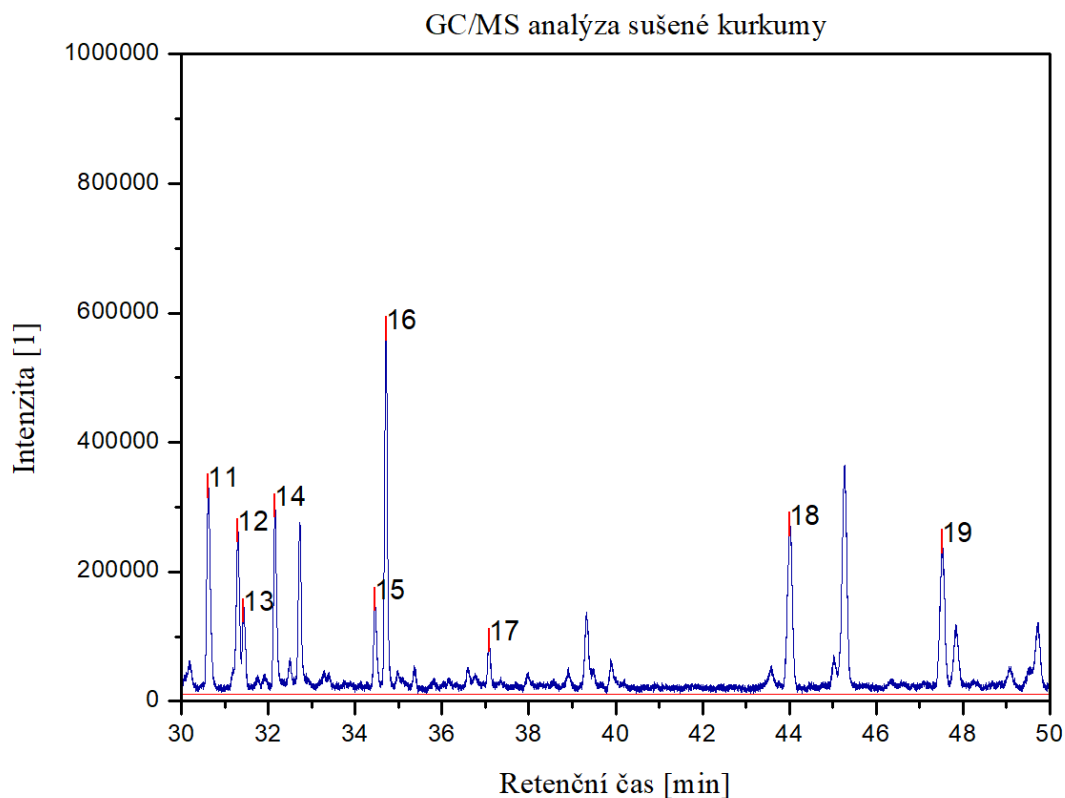
Celkový obsah majoritních složek činil 84,8 %, Jejich retenční časy, jsou zaznačené viz Tabulka 7 společně s hodnotou plochy píku v %, absolutní hodnotou plochy píku a SI (similarity index), který udává shodu hmotnostního spektra analytu s knihovnou spekter. Vyznačené retenční píky můžeme vidět na Grafech 21-23. Strukturní vzorce sloučenin jsou zaznačeny v tabulce 10.



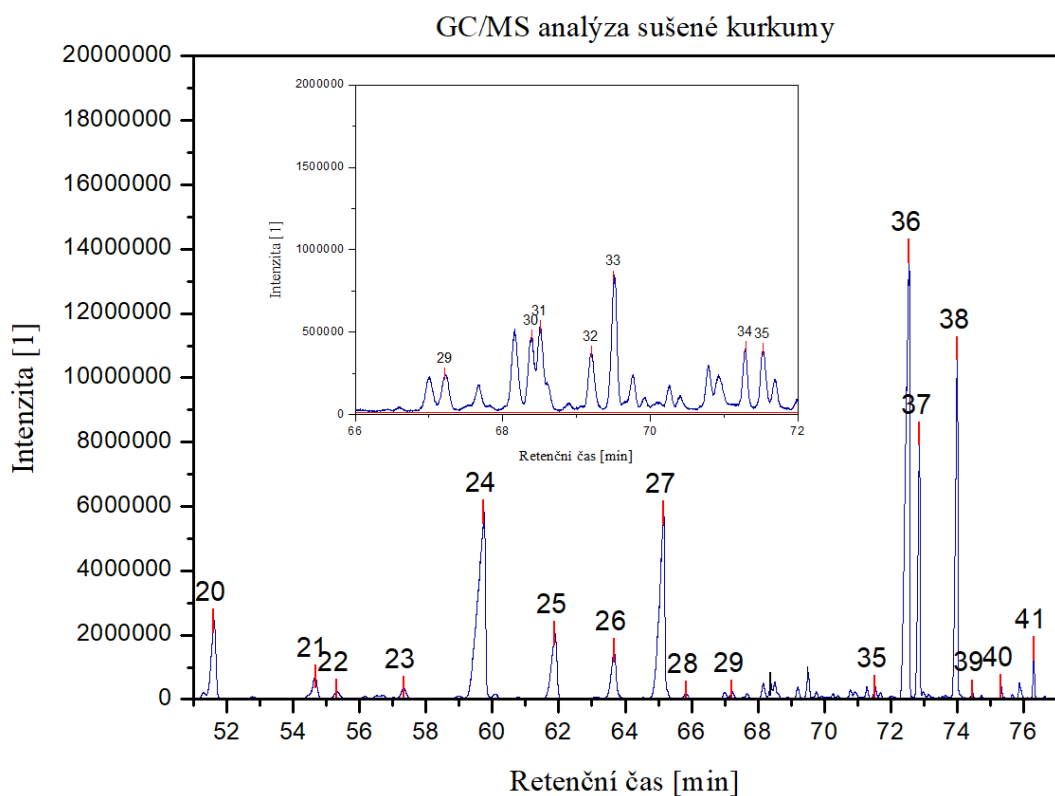
Graf 20: Chromatogram analýzy sušené kurkumy



Graf 21: Chromatogram (14-27) analýzy sušené kurkumy s vyznačenými píky



Graf 22: Chromatogram (30-50 min) analýzy sušené kurkumy s vyznačenými píky



Graf 23: Chromatogram (51-77) analýzy sušené kurkumy s vyznačenými píky

Tabulka 7: Seznam analyzovaných látek v sušené kurkumě s názvem sloučeniny retenčním časem, relativní plochou píku (area %), absolutní plochou píku (area) a procentuální shodou hmotnostního spektra s knihovnou spekter (SI-similarity index)

Peak#	Název sloučeniny	Retenční čas [min]	Plocha píku [%]	Plocha píku	SI
1	Sabinen	14.34	0.10	443261	92
2	β -Myrcen	15.71	0.08	392399	92
3	α -Felandren	16.34	0.04	144904	92
4	3-Karen	16.89	0.42	1953383	94
5	o-Cymen	17.48	0.55	2585310	93
6	Eukalyptol	17.94	1.71	7736539	95
7	D-Limonen	18.21	1.15	5442697	93
8	Sabinen hydrát	20.91	0.14	615160	91
9	Linalool	24.63	0.37	1604399	97
10	4-Acetyl-1-methylcyclohexene	26.17	0.69	3029405	94
11	Ethanon, 1-(4-metylfenyl)-	30.61	0.39	1700569	96
12	(-)-4-Terpineol	31.28	0.25	1111381	93
13	p-Cymen-8-ol	31.42	0.09	408074	90
14	α -Terpineol	32.14	0.28	1242180	94
15	Kumaldehyd	34.45	0.13	603247	91
16	(-)-Carvon	34.70	0.52	2299251	94
17	Linalyl acetát	37.08	0.07	297083	93
18	α -Terpinyl acetát	44.00	0.44	1883049	90
19	Kopaen	47.51	0.39	1659740	92
20	Caryofylen	51.59	5.51	24121094	96
21	m-Camforen	54.63	1.57	6906654	76
22	Humulen	55.28	0.56	2494279	92
23	cis- β -Farnesen	57.30	0.67	2991571	92
24	α -Kurkumen	59.68	18.94	83929766	91
25	Zingiberen	61.83	4.24	19109562	96
26	β -Bisabolen	63.63	3.14	13961852	93
27	Seskvisabinen B	65.11	13.06	58131887	94
28	cis- γ -Bisabolen	65.80	0.22	980730	86
29	Humulen-1,2-epoxid	67.21	0.26	1085460	86
30	ar-Turmerol	68.38	0.38	1647866	89
31	Turmeron	68.49	0.62	2755563	86
32	(E)- γ -Atlantone	69.19	0.36	1601410	85
33	Benzen, 1-metyl-4-(1-metylpropyl)	69.50	0.82	3673445	85
34	Kurlon	71.28	0.28	1243136	88
35	Bergamotol, Z- α -trans-	71.52	0.29	1332895	81
36	Ar-Turmeron	72.53	23.11	102440249	93
37	Turmeron	72.84	6.23	28603834	93
38	Kurlon	73.99	10.57	47258414	96
39	(Z)- α -Atlanton	74.45	0.14	635112	86
40	(6R,7R)-Bisabolon	75.33	0.25	1132090	94
41	(E)-Atlanton	76.31	0.92	4153938	93

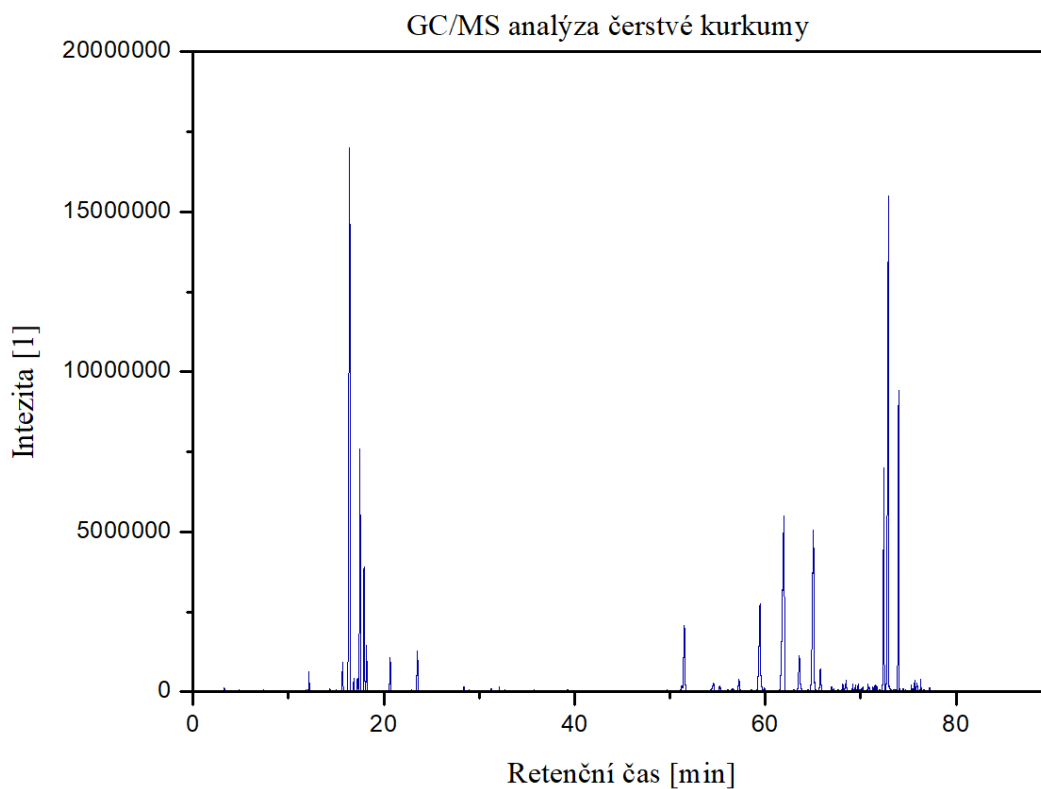
3.7 Analýza čerstvé kurkumy

Při analýze sušené kurkumy bylo stanoveno celkem 41 látek. Majoritními složkami byly viz Tabulka 8.

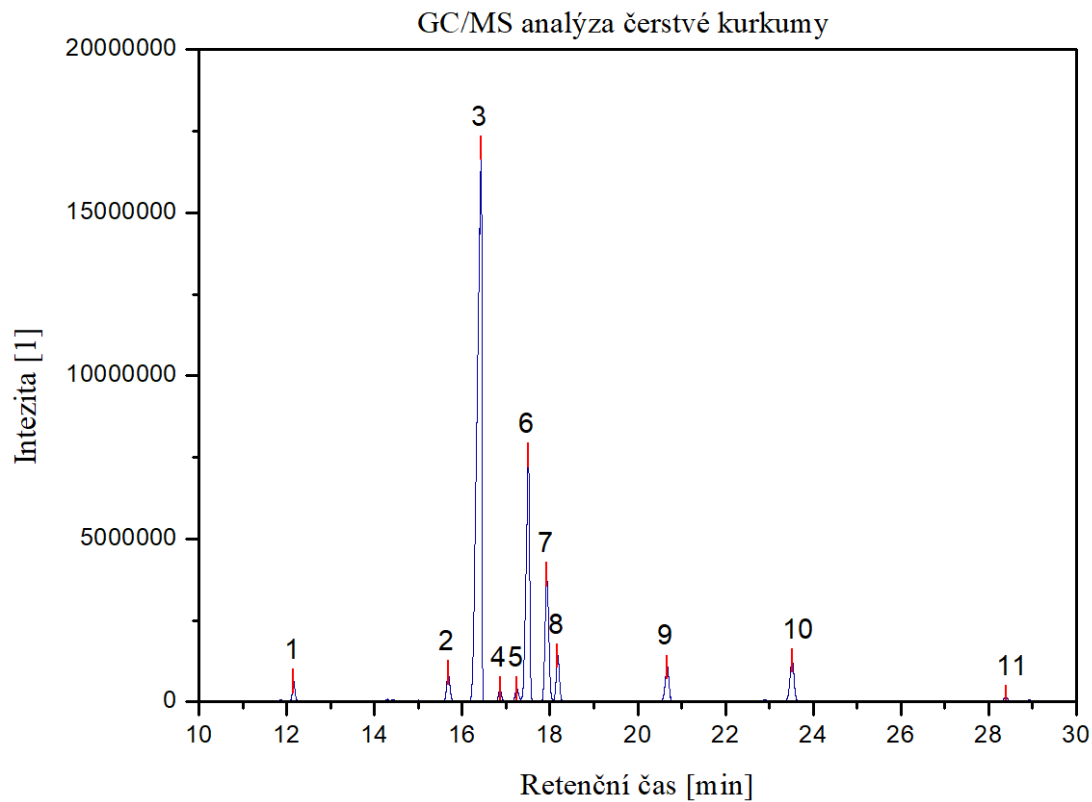
Tabulka 8: Majoritní složky sušené kurkumy stanovené pomocí HS-SPME-GC/MS

Název sloučeniny	Obsah v čerstvé kurkumě [%]	Pík
α -Thujen	21,59	3
Turmeron	17,31	31
Zingiberen	12,80	19
Seskvisabinen B	8,89	21
Ar-Turmeron	6,09	30
Kurlon	5,50	32
m-Cymen	5,45	6
Ar-Kurkumen	5,16	18
Caryofylen	3,01	14

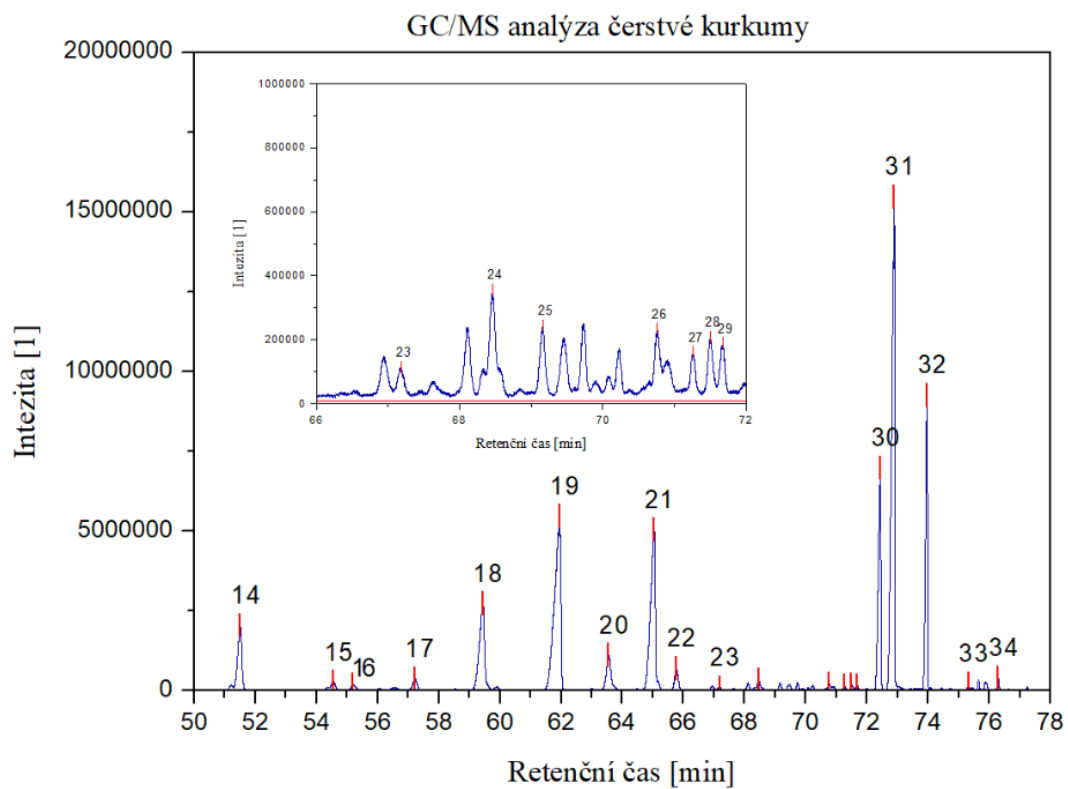
Celkový obsah majoritních složek činil 85,8 %, Jejich retenční časy, jsou zaznačené viz Tabulka 9 společně s hodnotou plochy píku v %, absolutní hodnotou plochy píku a SI (similarity index), který udává shodu hmotnostního spektra analytu s knihovnou spekter. Vyznačené retenční píky můžeme vidět na Grafech 25-26. Strukturní vzorce sloučenin jsou zaznačeny v tabulce 10.



Graf 24: Chromatogram analýzy čerstvé kurkumy



Graf 25: Chromatogram (10-30) analýzy čerstvé kurkumy s vyznačenými píky



Graf 26: Chromatogram (50-78) analýzy čerstvé kurkumy s vyznačenými píky

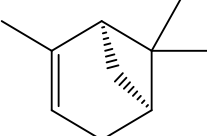
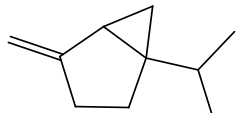
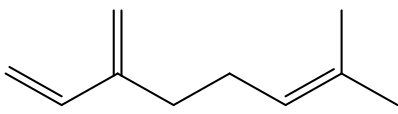
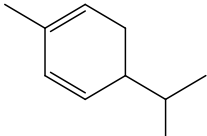
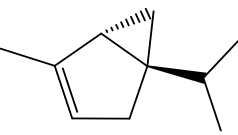
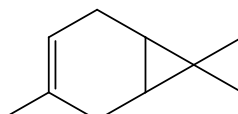
Tabulka 9: Seznam analyzovaných látek v čerstvé kurkumě s názvem sloučeniny retenčním časem, relativní plochou píku (area %), absolutní plochou píku (area) a procentuální shodou hmotnostního spektra s knihovnou spekter (SI-similarity index)

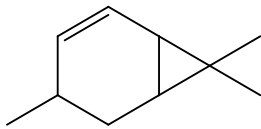
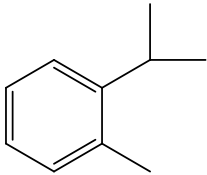
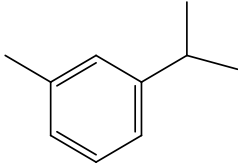
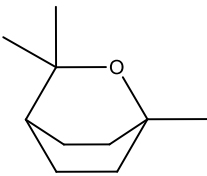
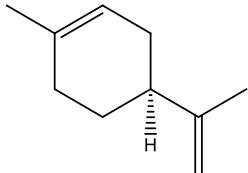
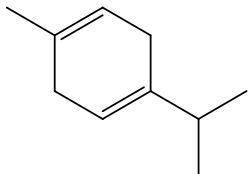
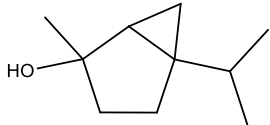
Peak#	Název sloučeniny	Retenční čas [min]	Plocha píku [%]	Plocha píku	SI
1	α -Pinen	12.17	0.41	2 392	94
2	β -Myrcen	15.70	0.77	4 527	93
3	α -Thujen	16.44	21.59	125 698	93
4	3-Karen	16.88	0.30	1 772	95
5	(+)-4-Karen	17.26	0.36	2 078	93
6	m-Cymen	17.51	5.45	32 457	93
7	Eukalyptol	17.94	2.72	16 081	93
8	D-Limonen	18.19	1.12	6 543	93
9	γ -Terpinén	20.69	1.12	6 463	94
10	Cyclohexen-3-metyl-6-(1-metyletyliden)	23.54	1.22	7 163	96
11	Myrcenon	28.42	0.12	718 212	93
12	(-)-4-Terpineol	31.28	0.10	565 587	88
13	α -Terpineol	32.12	0.10	576 749	93
14	Caryofylen	51.53	3.01	17 180	96
15	m-Camforen	54.58	0.49	2 855	76
16	1,4,7,-Cycloundecatrien, 1,5,9,9-tetrametyl	55.23	0.26	1 272	92
17	cis- β -Farnesen	57.25	0.55	3 230	92
18	α -Kurkumen	59.45	5.16	30 205	91
19	Zingiberen	61.97	12.80	74 246	96
20	β -Bisabolen	63.58	1.83	10 690	94
21	Seskvisabinen B	65.04	8.89	52 004	88
22	trans- γ -Bisabolen	65.78	0.90	5 229	90
23	Humulen-1,2-epoxid	67.18	0.07	422 075	81
24	Turmeron	68.47	0.19	2 354	91
25	(E)- γ -Atlanton	69.17	0.43	1 139	86
26	Zingiberenol	70.77	0.17	1 028	91
27	Kurlon	71.26	0.08	452 779	86
28	Zingiberenol	71.51	0.11	683 894	83
29	(E)- γ -Atlanton	71.68	0.10	606 322	83
30	Ar-Turmeron	72.43	6.09	35 275	95
31	Turmeron	72.89	17.31	101 705	93
32	Kurlon	73.96	5.50	29 882	94
33	(6R,7R)-Bisabolon	75.32	0.09	533 532	92
34	(E)-Atlanton	76.29	0.19	1 092	91

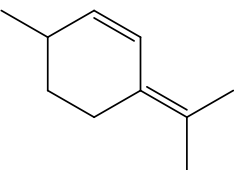
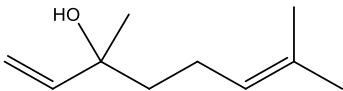
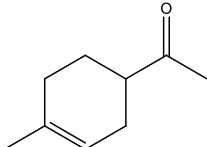
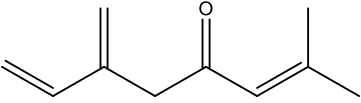
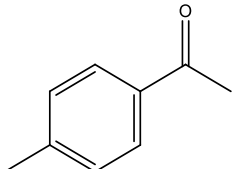
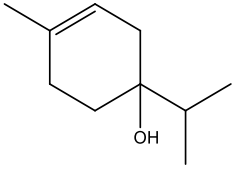
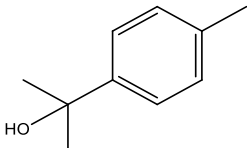
4 SOUHRN ANALYZOVANÝCH LÁTEK V KURKUMĚ

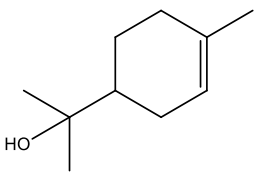
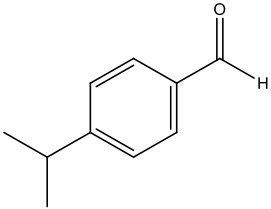
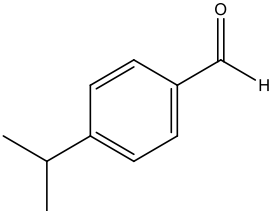
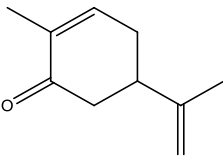
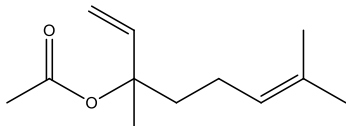
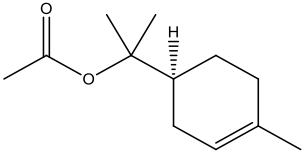
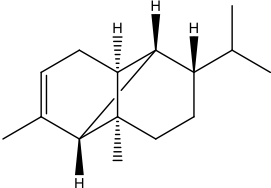
4.1 Seznam všech analyzovaných složek kurkumy

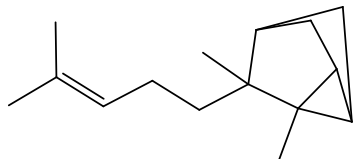
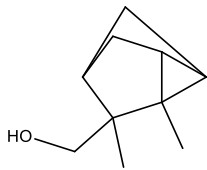
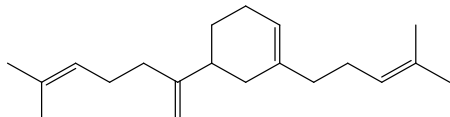
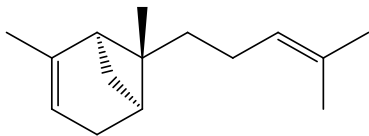
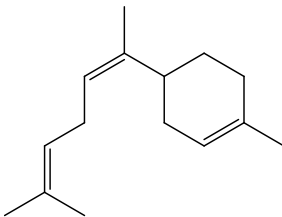
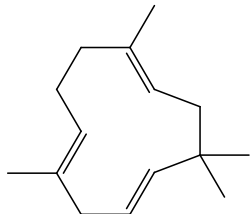
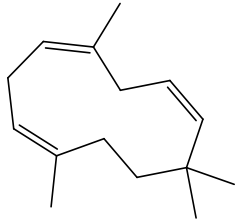
Tabulka 10: Seznam sloučenin napříč vzorky jejich plochy píku a strukturní vzorec

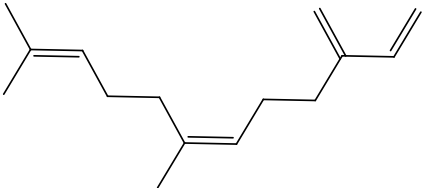
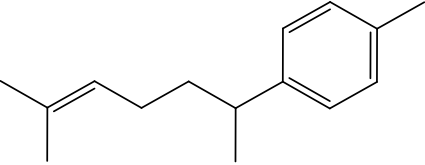
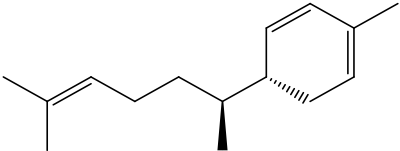
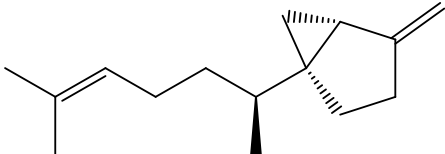
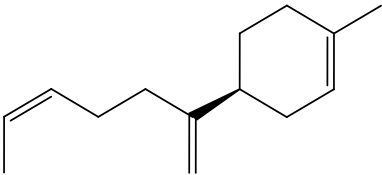
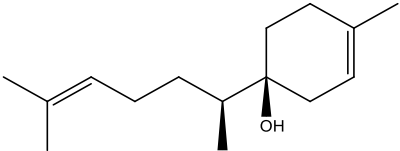
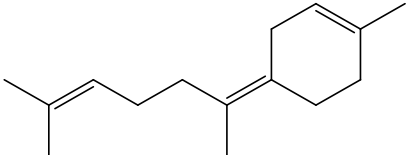
	Název sloučeniny	BIO plocha [%]	Sušená plocha [%]	Čerstvá plocha [%]	Strukturní vzorec
1	<i>α-Pinen</i>			0.41	
2	<i>Sabinen</i>		0.1		
3	<i>β-Myrcen</i>		0.08	0.77	
4	<i>α-Felandren</i>		0.04		
5	<i>α-Thujen</i>			21.59	
6	<i>3-Karen</i>		0.42	0.30	

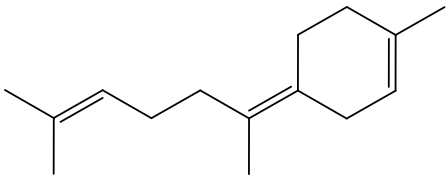
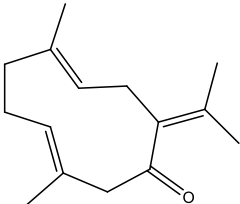
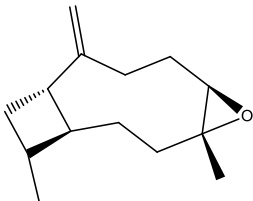
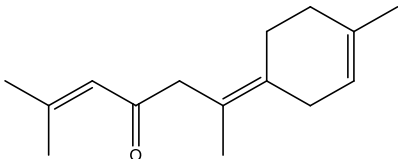
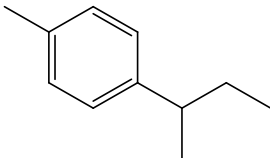
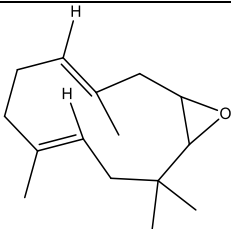
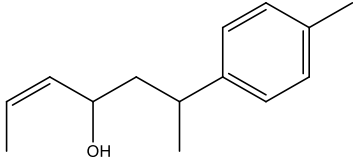
	Název sloučeniny	BIO plocha [%]	Sušená plocha [%]	Čerstvá plocha [%]	Chemický vzorec
7	<i>(+)-4-Karen</i>			0.36	
8	<i>o-Cymen</i>		0.55		
9	<i>m-Cymen</i>			5.45	
10	<i>Eukalyptol</i>	0.37	1.71	2.72	
11	<i>D-Limonen</i>		1.15	1.12	
12	<i>γ-Terpinén</i>			1.12	
13	<i>Sabinen hydrát</i>		0.14		

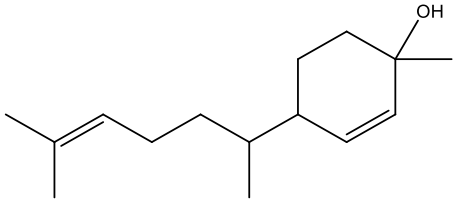
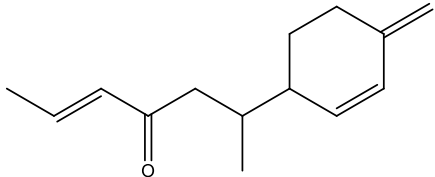
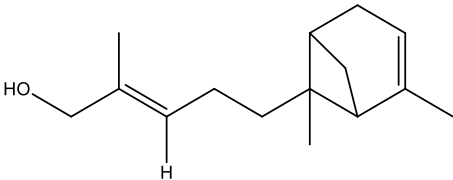
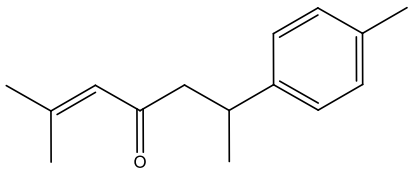
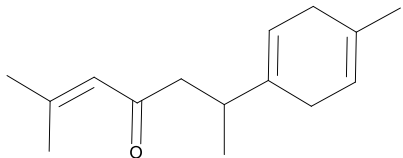
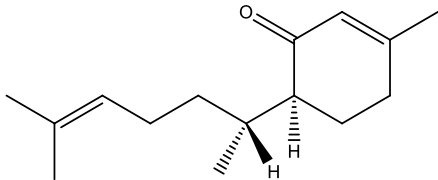
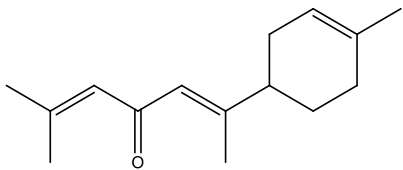
	Název sloučeniny	BIO plocha [%]	Sušená plocha [%]	Čerstvá plocha [%]	Chemický vzorec
14	<i>Cyclohexen-3-metyl-6-(1-metyletyliden)</i>			1.22	
15	<i>Linalool</i>		0.37		
16	<i>4-Acetyl-1-methylcyclohexene</i>		0.69		
17	<i>Myrcenon</i>			0.12	
18	<i>Ethanon, 1-(4-metylfenyl)-</i>		0.39		
19	<i>(-)-4-Terpineol</i>		0.25	0.10	
20	<i>p-Cymen-8-ol</i>	0.55	0.09		

	Název sloučeniny	BIO plocha [%]	Sušená plocha [%]	Čerstvá plocha [%]	Chemický vzorec
21	<i>α-Terpineol</i>	0.19	0.28	0.10	
22	<i>Kumaldehyd</i>		0.13		
23	<i>(-)-Carvon</i>		0.52		
24	<i>Linalyl acetát</i>		0.07		
25	<i>α-Terpinyl acetát</i>		0.44		
26	<i>Kopaen</i>		0.39		
27	<i>Karyofylen</i>	9.04	5.51	3.01	

	Název sloučeniny	BIO plocha [%]	Sušená plocha [%]	Čerstvá plocha [%]	Chemický vzorec
28	<i>α-Santalene</i>	12.67			
29	<i>Teresantalol</i>	0.98			
30	<i>m-Camforen</i>		1.57	0.49	
31	<i>trans-α-Bergamoten</i>	3.19			
32	<i>cis-α-Bisabolen</i>	3.15			
33	<i>Humulen</i>		0.56		
34	<i>1,4,7-Cycloundecatrien, 1,5,9,9-tetrametyl</i>			0.26	

	Název sloučeniny	BIO plocha [%]	Sušená plocha [%]	Čerstvá plocha [%]	Chemický vzorec
35	<i>cis-β-Farnesen</i>	1.17	0.67	0.55	
36	<i>Ar-Kurkumen</i>	13.34	18.94	5.16	
37	Zingiberen	3.94	4.24	12.80	
38	Seskvisabinen B	14.83	13.06	8.89	
39	β-Bisabolen	6.12	3.14	1.83	
40	β-Bisabolol	0.42			
41	<i>cis-γ-Bisabolen</i>		0.22		

	Název sloučeniny	BIO plocha [%]	Sušená plocha [%]	Čerstvá plocha [%]	Chemický vzorec
42	trans-γ-Bisabolen			0.9	
43	Germacron	0.17			
44	Karyofylenoxid	1.24			
45	(E)-γ-Atlanton	1.08	0.36	0.29	
46	Benzene, 1-metyl-4-(1-metylpropyl)	0.56	0.82		
47	Humulene-1,2-epoxid	0.19	0.26	0.07	
48	ar – Turmerol		0.38		

	Název sloučeniny	BIO plocha [%]	Sušená plocha [%]	Čerstvá plocha [%]	Chemický vzorec
50	Zingiberenol	0.19		0.28	
51	Kurlon	6.22	10.85	5.58	
52	Bergamotol, Z-α-trans-	0.28	0.29		
53	Ar-Turmeron	15.3	23.11	6.09	
54	Turmeron	3.82	6.84	17.74	
55	(6R,7R)-Bisabolon	0.26	0.25	0.09	
56	(E)-Atlanton	0.57	0.92	0.19	

5 ZÁVĚR

V rámci této bakalářské práce byla provedena optimalizace a aplikace metody HS-SPME-GC-MS pro analýzu nízkomolekulárních těkavých látek v různých typech kurkumy. Byly porovnány různé typy SPME vláken, teplotní programy a navážky vzorků. Optimální výsledky byly dosaženy při použití vlákna DVB/Carbon WR/PDMS, které vykazovalo nejvyšší výtěžnost a nejširší spektrum extrahovaných látek napříč analyzovanými vzorky.

Analýzou vzorků kurkumy (BIO, sušená a čerstvá) bylo identifikováno 56 těkavých látek, přičemž mezi majoritní složky patřily zejména α -thujen, turmeron, zingiberen, seskvisabinen B, Ar-turmeron, kurlon a caryofylen. Výsledky ukazují, že složení těkavých látek se liší v závislosti na typu vzorku. U všech vzorků byl vysoký podíl seskviterpenů, které jsou charakteristické pro esenciální olej kurkumy.

Použití nasyceného roztoku NaCl se ukázalo jako neúčinné a lepších výsledků bylo dosaženo bez jeho přídavku. Optimalizace navážky potvrdila, že pro sušené i BIO vzorky je vhodné množství 50 mg, u čerstvé kurkumy 0,1 g. Z porovnání teplotních programů vyplývá, že kratší (30minutový) program je dostatečný pro kvantitativní analýzu majoritních složek, ale pro přesnější a reprodukovatelnější analýzu je vhodnější program 90minutový.

Metoda HS-SPME-GC-MS se ukázala jako vhodná pro rychlou a efektivní analýzu těkavých látek v kurkumě. Výsledky této práce mohou sloužit jako podklad pro další výzkum zaměřený na srovnání různých druhů kurkumy či sledování změn složení v závislosti na původu, zpracování a skladování. Pro jednoznačnou volbu optimálních podmínek SPME analýzy by však bylo vhodné provést další experimenty zaměřené na vliv dalších faktorů, jako je délka extrakce, inkubační čas nebo použití různých typů vláken.

Celkově lze říct, že zvolená metoda umožňuje spolehlivě identifikovat a kvantifikovat majoritní těkavé složky kurkumy a přispívá k lepšímu pochopení jejího chemického složení.

Do budoucna by daný výzkum mohl směřovat k ještě sofistikovanější optimalizaci, jako je například teplota inkubace nebo nastavení hmotnostního detektoru a tím docílit k lepšímu a efektivnějšímu poznání nízkomolekulárních těkavých látek v kurkumě.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] RAVINDRAN, P. N.; BABU, K. Nirmal a SIVARAMAN, Kandaswamy (ed.). *Turmeric*. Online. CRC Press, 2007. ISBN 9780429124013. Dostupné z: <https://doi.org/10.1201/9781420006322>. [cit. 2025-04-02].
- [2] FERREIRA, Flavio Dias; KEMMELMEIER, Carlos; ARROTÉIA, Carla Cristina; DA COSTA, Christiane Luciana; MALLMANN, Carlos Augusto et al. Inhibitory effect of the essential oil of *Curcuma longa* L. and curcumin on aflatoxin production by *Aspergillus flavus* Link. Online. *Food Chemistry*. 2013, roč. 136, č. 2, s. 789-793. ISSN 03088146. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2012.08.003>. [cit. 2025-04-02].
- [3] DIXIT, SC a AWASTHI, PK. Chemical composition of *Curcuma Longa* leaves and rhizome oil from the plains of Northern India. Online. *Journal of Young Pharmacists*. 2009, roč. 1, č. 4. ISSN 0975-1483. Dostupné z: <https://doi.org/10.4103/0975-1483.59319>. [cit. 2025-04-02].
- [4] BABU, T. J. Z. K. N. (1992) "Effect of storage of fresh turmeric rhizomes on oleoresin and curcumin contents", *Journal of Spices and Aromatic Crops*, 1(1), pp. 55–58. Dostupné z: <https://www.updatepublishing.com/journal/index.php/josac/article/view/4286> [cit. 2025-04-02].
- [5] JAYASHREE, E a ZACHARIAH, T JOHN. Processing of turmeric (*Curcuma longa*) by different curing methods and its effect on quality. Online. *The Indian Journal of Agricultural Sciences*. 2016, roč. 86, č. 5, s. 696-698. ISSN 2394-3319. Dostupné z: <https://doi.org/10.56093/ijas.v86i5.58358>. [cit. 2025-04-02].
- [6] LEONG-ŠKORNIČKOVÁ, Jana a NEWMAN, M. F. *Gingers of Cambodia, Laos & Vietnam*. Singapore: Singapore Botanic Gardens, National Parks Board, 2015. ISBN 978-981-09-6380-4.
- [7] JAYAPRAKASHA, G.K.; JAGAN MOHAN RAO, L. a SAKARIAH, K.K. Chemistry and biological activities of *C. longa*. Online. *Trends in Food Science & Technology*. 2005, roč. 16, č. 12, s. 533-548. ISSN 09242244. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2005.08.006>. [cit. 2025-04-02].

- [8] MAU, J. Composition and antioxidant activity of the essential oil from *Curcuma zedoaria*. Online. *Food Chemistry*. 2003, roč. 82, č. 4, s. 583-591. ISSN 03088146. Dostupné z: [https://doi.org/10.1016/S0308-8146\(03\)00014-1](https://doi.org/10.1016/S0308-8146(03)00014-1). [cit. 2025-04-02].
- [9] LOBO, Richard; PRABHU, Kirti S; SHIRWAIKAR, Annie a SHIRWAIKAR, Arun. *Curcuma zedoaria* Rosc. (white turmeric): a review of its chemical, pharmacological and ethnomedicinal properties. Online. *Journal of Pharmacy and Pharmacology*. 2009, roč. 61, č. 1, s. 13-21. ISSN 0022-3573. Dostupné z: <https://doi.org/10.1211/jpp.61.01.0003>. [cit. 2025-04-02].
- [10] PARTHASARATHY, Villupanoor A.; CHEMPAKAM, Bhageerathy a ZACHARIAH, T. John (ed.). *Chemistry of spices*. Wallingford: CABI, c2008. ISBN 978-1-84593-405-7.
- [11] MAU, J. Composition and antioxidant activity of the essential oil from *Curcuma zedoaria*. Online. *Food Chemistry*. 2003, roč. 82, č. 4, s. 583-591. ISSN 03088146. Dostupné z: [https://doi.org/10.1016/S0308-8146\(03\)00014-1](https://doi.org/10.1016/S0308-8146(03)00014-1). [cit. 2025-04-02].
- [12] JAYAPRAKASHA, G.K.; JAGAN MOHAN RAO, L. a SAKARIAH, K.K. Chemistry and biological activities of *C. longa*. Online. *Trends in Food Science & Technology*. 2005, roč. 16, č. 12, s. 533-548. ISSN 09242244. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2005.08.006>. [cit. 2025-04-02].
- [13] KUNNUMAKKARA, Ajaikumar B.; ANAND, Preetha a AGGARWAL, Bharat B. Curcumin inhibits proliferation, invasion, angiogenesis and metastasis of different cancers through interaction with multiple cell signaling proteins. Online. *Cancer Letters*. 2008, roč. 269, č. 2, s. 199-225. ISSN 03043835. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.canlet.2008.03.009>. [cit. 2025-04-02].
- [14] SATOSKAR, R R; SHAH, S J a SHENOY, S G. Evaluation of anti-inflammatory property of curcumin (diferuloyl methane) in patients with postoperative inflammation. Online. *Int J Clin Pharmacol Ther Toxicol*. 1986, no. 24, article 24, s. 651-654. Dostupné z: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/3546166/>. [cit. 2025-04-02].
- [15] MASUDA, Toshiya; HIDAKA, Kayo; SHINOHARA, Ayumi; MAEKAWA, Tomomi; TAKEDA, Yoshio et al. Chemical Studies on Antioxidant Mechanism of Curcuminoid: Analysis of Radical Reaction Products from Curcumin. Online. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 1999, roč. 47, č. 1, s. 71-77. ISSN 0021-8561. Dostupné z: <https://doi.org/10.1021/jf9805348>. [cit. 2025-04-02].

- [16] NEGI, P. S.; JAYAPRAKASHA, G. K.; JAGAN MOHAN RAO, L. a SAKARIAH, K. Antibacterial Activity of Turmeric Oil: A Byproduct from Curcumin Manufacture. Online. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 1999, roč. 47, č. 10, s. 4297-4300. ISSN 0021-8561. Dostupné z: <https://doi.org/10.1021/jf990308d>. [cit. 2025-04-02].
- [17] JACOB, J.N. Comparative Studies in Relation to the Structure and Biochemical Properties of the Active Compounds in the Volatile and Nonvolatile Fractions of Turmeric (*C. longa*) and Ginger (*Z. officinale*). Online. In: . *Studies in Natural Products Chemistry*. Elsevier, 2016, s. 101-135. ISBN 9780444636027. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63602-7.00004-7>. [cit. 2025-04-02].
- [18] TILAK, Jai C.; BANERJEE, Meenal; MOHAN, Hari a DEVASAGAYAM, T. P. A. Antioxidant availability of turmeric in relation to its medicinal and culinary uses. Online. *Phytotherapy Research*. 2004, roč. 18, č. 10, s. 798-804. ISSN 0951-418X. Dostupné z: <https://doi.org/10.1002/ptr.1553>. [cit. 2025-04-02].
- [19] PARK, So-Young a KIM, Darrick S. H. L. Discovery of Natural Products from *Curcuma longa* that Protect Cells from Beta-Amyloid Insult: A Drug Discovery Effort against Alzheimer's Disease. Online. *Journal of Natural Products*. 2002, roč. 65, č. 9, s. 1227-1231. ISSN 0163-3864. Dostupné z: <https://doi.org/10.1021/np010039x>. [cit. 2025-04-02].
- [20] WEISS, E. A. *Spice crops*. Wallingford, Oxon, UK: CABI Publishing, 2002. ISBN 0-85199-605-1. Dostupné také z: <http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy0611/2001052651-t.html>.
- [21] GOPALAN, Began; GOTO, Motonobu; KODAMA, Akio a HIROSE, Tsutomu. Supercritical Carbon Dioxide Extraction of Turmeric (*Curcuma longa*). Online. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2000, roč. 48, č. 6, s. 2189-2192. ISSN 0021-8561. Dostupné z: <https://doi.org/10.1021/jf9908594>. [cit. 2025-04-02].
- [22] DOSOKY, Noura S. a SETZER, William N. Chemical Composition and Biological Activities of Essential Oils of *Curcuma* Species. Online. *Nutrients*. 2018, roč. 10, č. 9. ISSN 2072-6643. Dostupné z: <https://doi.org/10.3390/nu10091196>. [cit. 2025-04-02].
- [23] SANDEEP, I S; SANGHAMITRA, Nayak a SUJATA, Mohanty. Differential effect of soil and environment on metabolic expression of turmeric (*Curcuma longa* cv. Roma). Online. *Indian J Exp Biol*. 2015, no. 53[6], s. 406-411. Dostupné z: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26155681/>. [cit. 2025-04-02].

- [24] SRINIVASAN, V.; THANKAMANI, C.K.; DINESH, R.; KANDIANNAN, K.; ZACHARIAH, T.J. et al. Nutrient management systems in turmeric: Effects on soil quality, rhizome yield and quality. Online. *Industrial Crops and Products*. 2016, roč. 85, s. 241-250. ISSN 09266690. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2016.03.027>. [cit. 2025-04-02].
- [25] DOSOKY, Noura S. a SETZER, William N. Biological Activities and Safety of Citrus spp. Essential Oils. Online. *International Journal of Molecular Sciences*. 2018, roč. 19, č. 7. ISSN 1422-0067. Dostupné z: <https://doi.org/10.3390/ijms19071966>. [cit. 2025-04-02].
- [26] DOSOKY, Noura S.; SATYAL, Prabodh a SETZER, William N. Variations in the Volatile Compositions of Curcuma Species. Online. *Foods*. 2019, roč. 8, č. 2, s. 3. ISSN 2304-8158. Dostupné z: <https://doi.org/10.3390/foods8020053>. [cit. 2025-04-03].
- [27] VELÍŠEK, Jan a HAJŠLOVÁ, Jana. *Chemie potravin*. 2. 3., rozš. a přeprac. vyd. Tábor: OSSIS, 2009. ISBN 978-80-86659-16-9.
- [28] GOEL, Ajay; KUNNUMAKKARA, Ajaikumar B. a AGGARWAL, Bharat B. Curcumin as “Curecumin”: From kitchen to clinic. Online. *Biochemical Pharmacology*. 2008, roč. 75, č. 4, s. 787-809. ISSN 00062952. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.bcp.2007.08.016>. [cit. 2025-04-03].
- [29] 100 Kurkumin. In: *dTest* [online]. Praha: vydavatel dTest]. Dostupné z: <https://www.dtest.cz/ecka/1/e-100-kurkumin> [cit. 2025-04-03].
- [30] HUSSAIN, Md. Ashraf; SUMON, Tofael Ahmed; MAZUMDER, Sabuj Kanti; ALI, Mir Mohammad; JANG, Won Je et al. Essential oils and chitosan as alternatives to chemical preservatives for fish and fisheries products: A review. Online. *Food Control*. 2021, roč. 129. ISSN 09567135. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2021.108244>. [cit. 2025-04-03].
- [31] SMAOUI, Slim; BEN HLIMA, Hajer; TAVARES, Loleny; ENNOURI, Karim; BEN BRAIEK, Olfa et al. Application of essential oils in meat packaging: A systemic review of recent literature. Online. *Food Control*. 2022, roč. 132. ISSN 09567135. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2021.108566>. [cit. 2025-04-03].
- [32] RAHMAN, Mizanur; ISLAM, Raihanul; HASAN, Shariful; ZZAMAN, Wahidu; RANA, Md Rahmatuzzaman et al. A Comprehensive Review on Bio-Preservation of

- Bread: An Approach to Adopt Wholesome Strategies. Online. *Foods*. 2022, roč. 11, č. 3. ISSN 2304-8158. Dostupné z: <https://doi.org/10.3390/foods11030319>. [cit. 2025-04-03].
- [33]BADOLA, Richa; PRASAD, Writdhama; PANJAGARI, Narender Raju; SINGH, R. R. B.; SINGH, Ashish Kumar et al. Khoa and khoa based traditional dairy products: preparation, spoilage and shelf life extension. Online. *Journal of Food Science and Technology*. 2023, roč. 60, č. 4, s. 1209-1221. ISSN 0022-1155. Dostupné z: <https://doi.org/10.1007/s13197-022-05355-x>. [cit. 2025-04-03].
- [34]SHAHIDI, Fereidoon a HOSSAIN, Abul. Preservation of aquatic food using edible films and coatings containing essential oils: a review. Online. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*. 2022, roč. 62, č. 1, s. 66-105. ISSN 1040-8398. Dostupné z: <https://doi.org/10.1080/10408398.2020.1812048>. [cit. 2025-04-03].
- [35]PANDEY, Vinay Kumar; ISLAM, Rayees Ul; SHAMS, Rafeeya a DAR, Aamir Hussain. A comprehensive review on the application of essential oils as bioactive compounds in Nano-emulsion based edible coatings of fruits and vegetables. Online. *Applied Food Research*. 2022, roč. 2, č. 1. ISSN 27725022. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.afres.2022.100042>. [cit. 2025-04-03].
- [36]CARPENA, Maria; NUÑEZ-ESTEVEZ, Bernabe; SORIA-LOPEZ, Anton; GARCIA-OLIVEIRA, Paula a PRIETO, Miguel A. Essential Oils and Their Application on Active Packaging Systems: A Review. Online. *Resources*. 2021, roč. 10, č. 1. ISSN 2079-9276. Dostupné z: <https://doi.org/10.3390/resources10010007>. [cit. 2025-04-03].
- [37]RAVEAU, Robin; FONTAINE, Joël a LOUNÈS-HADJ SAHRAOUI, Anissa. Essential Oils as Potential Alternative Biocontrol Products against Plant Pathogens and Weeds: A Review. Online. *Foods*. 2020, roč. 9, č. 3. ISSN 2304-8158. Dostupné z: <https://doi.org/10.3390/foods9030365>. [cit. 2025-04-03].
- [38]WAN, Chunpeng a RENGASAMY, Kannan R. R. Editorial: Application of Plant Natural Products and New Emerging Technologies for the Postharvest Storage of Fruits. Online. *Frontiers in Nutrition*. 2022, roč. 9. ISSN 2296-861X. Dostupné z: <https://doi.org/10.3389/fnut.2022.884438>. [cit. 2025-04-03].
- [39]BASAID, Khadija; CHEBLI, Bouchra; MAYAD, El Hassan; FURZE, James N.; BOUHARROUD, Rachid et al. Biological activities of essential oils and lipopeptides applied to control plant pests and diseases: a review. Online. *International Journal of*

- Pest Management*. 2021, roč. 67, č. 2, s. 155-177. ISSN 0967-0874. Dostupné z: <https://doi.org/10.1080/09670874.2019.1707327>. [cit. 2025-04-03].
- [40] EL KHETABI, Assia; LAHLALI, Rachid; EZRARI, Said; RADOUANE, Nabil; LYOUSFI, Nadia et al. Role of plant extracts and essential oils in fighting against postharvest fruit pathogens and extending fruit shelf life: A review. Online. *Trends in Food Science & Technology*. 2022, roč. 120, s. 402-417. ISSN 09242244. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2022.01.009>. [cit. 2025-04-03].
- [41] RUPRICH, prof.J. a , CZVP SZÚ. Nežádoucí účinky doplňků stravy obsahujících kurkumu: Informace Centra zdraví, výživy a potravin SZÚ. Online. 2022. Dostupné z: <https://bezpecnostpotravin.cz/nezadouci-ucinky-doplнку-stravy-obsahujících-kurkumu/>. [cit. 2025-04-03].
- [42] Nařízení Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1333/2008 ze dne 16. prosince 2008 o potravinářských přídatných látkách (Text s významem pro EHP). In: . 2008.
- [43] ŠTULÍK, Karel. *Analytické separační metody*. Praha: Karolinum, 2005. ISBN 80-246-0852-9.
- [44] FRIEDECKÝ, Bedřich a Karel LEMR. Úvod do hmotnostní spektrometrie. *Klinická biochemie a metabolismus*. 2012, **20**(3), 152-157. ISSN 1210-7921. Dostupné také z: <http://www.cskb.cz/res/file/KBM-pdf/2012/2012-3/KBM12-3-Friedecky-152.pdf>
- [45] LORENZO-PARODI, Nerea; KAZIUR, Wiebke; STOJANOVIĆ, Nenad; JOCHMANN, Maik A. a SCHMIDT, Torsten C. Solventless microextraction techniques for water analysis. Online. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2019, roč. 113, s. 321-331. ISSN 01659936. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2018.11.013>. [cit. 2025-04-06].
- [46] LORD, Heather a PAWLISZYN, Janusz. Evolution of solid-phase microextraction technology. Online. *Journal of Chromatography A*. 2000, roč. 885, č. 1-2, s. 153-193. ISSN 00219673. Dostupné z: [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(00\)00535-5](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(00)00535-5). [cit. 2025-04-06].
- [47] JUNTING, Liu; PENG, Cheng a SUZUKI, O. Solid-phase microextraction (SPME) of drugs and poisons from biological samples. Online. *Forensic Science International*. 1998, roč. 97, č. 2-3, s. 93-100. ISSN 03790738. Dostupné z: [https://doi.org/10.1016/S0379-0738\(98\)00093-0](https://doi.org/10.1016/S0379-0738(98)00093-0). [cit. 2025-04-06].

- [48] KUŽELOVÁ, Kristýna. *Analytické hodnocení účinných látek kapalinovou chromatografií VI*. Online, Diplomová práce, vedoucí PharmDr. Pavla Pilařová, Ph.D. Hradec Králové, 2014: UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ KATEDRA FARMACEUTICKÉ CHEMIE A KONTROLY LÉČIV, 2014. Dostupné z: https://dspace.cuni.cz/bitstream/handle/20.500.11956/72406/DPTX_2012_1_11160_0_279088_0_128665.pdf?sequence=1&isAllowed=y. [cit. 2025-04-06].
- [49] RODINKOV, O. V.; BUGAICHENKO, A. S. a MOSKVIN, L. N. Static Headspace Analysis and Its Current Status. Online. *Journal of Analytical Chemistry*. 2020, roč. 75, č. 1, s. 1-17. ISSN 1061-9348. Dostupné z: <https://doi.org/10.1134/S106193482001013X>. [cit. 2025-04-06].
- [50] ULRICH, S. Solid-phase microextraction in biomedical analysis. Online. *Journal of Chromatography A*. 2000, roč. 902, č. 1, s. 167-194. ISSN 00219673. Dostupné z: [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(00\)00934-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(00)00934-1). [cit. 2025-04-06].
- [51] Solid Phase Microextraction Fundamentals. [online]. February 13, 2023. Dostupné z: <https://www.agilent.com/cs/library/technicaloverviews/public/te-solid-phase-microextraction-fundamentals-spme-arrow-5994-5775en-agilent.pdf> [citováno 2025-04-14].
- [52] [GAO, Hu; YANG, Fang; ZHU, Bangqiang; YIN, Shishu; FU, Yawei et al. Optimization of HS-SPME-GC-MS for the Determination of Volatile Flavor Compounds in Ningxiang Pork. Online. *Foods*. 2023, roč. 12, č. 2. ISSN 2304-8158. Dostupné z: <https://doi.org/10.3390/foods12020297>. [cit. 2025-04-06].]
- [53] [FILATOVA, Maria; HAJŠLOVÁ, Jana a STUPAK, Michal. Detection of saffron adulteration by other plant species using SPME-GC-HRMS. Online. *European Food Research and Technology*. 2024, roč. 250, č. 3, s. 911-922. ISSN 1438-2377. Dostupné z: <https://doi.org/10.1007/s00217-023-04443-2>. [cit. 2025-04-06].]
- [54] [CHI, Xuelu; ZHANG, Yangdong; ZHENG, Nan; WANG, Jiaqi a LIU, Huimin. HS-GC-IMS and HS-SPME/GC-MS coupled with E-nose and E-tongue reveal the flavors of raw milk from different regions of China. Online. *Current Research in Food Science*. 2024, roč. 8. ISSN 26659271. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.crfs.2023.100673>. [cit. 2025-04-06].]

- [55][LIOUPI, Artemis; SAMPSONIDIS, Ioannis; VIRGILIOU, Christina; PAPOTI, Vassiliki T.; ZINOVIADOU, Kyriaki G. et al. Optimisation of the HS-SPME/GC-MS Approach by Design of Experiments Combined with Chemometrics for the Classification of Cretan Virgin Olive Oils. Online. *Metabolites*. 2022, roč. 12, č. 2. ISSN 2218-1989. Dostupné z: <https://doi.org/10.3390/metabo12020114>. [cit. 2025-04-06].]
- [56] CAO, Jie; QI, Meiling; FANG, Lianghua; ZHOU, Shan; FU, Ruonong et al. Solid-phase microextraction–gas chromatographic–mass spectrometric analysis of volatile compounds from Curcuma wenyujin Y.H. Chen et C. Ling. Online. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 2006, roč. 40, č. 3, s. 552-558. ISSN 07317085. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2005.07.050>. [cit. 2025-05-12].]
- [57] Gera-Untermhaus : Fr. Eugen Köhler. Online. Missouri Botanical Garden, 1883. Dostupné z: <https://archive.org/details/mobot31753002839105>. [cit. 2025-05-12].]

SEZNAM OBRÁZKŮ

Obrázek 1 Kurkumovník dlouhý (<i>Curcuma longa</i>) [57]	13
Obrázek 2 Kurkumin	14
Obrázek 3 Demetoxylurkumin	14
Obrázek 4 Bisdemetoxylurkumin	14
Obrázek 5 α -turmeron	15
Obrázek 6 β -turmeron	15
Obrázek 7 Ar-turmeron	15
Obrázek 8 β -seskvifelandren	15
Obrázek 9 Zingiberen	15
Obrázek 10 Germakron	15
Obrázek 11 Terpinolen	15
Obrázek 12 Ar-kurkumen	15
Obrázek 13 α -felandren	16
Obrázek 14 Schéma elektronové ionizace [44]	20
Obrázek 15 Schéma trojitého kvadrupólu při skenu produktových iontů [44]	21
Obrázek 16 Schéma trojitého kvadrupólu při skenu prekurzorových iontů. [44]	22
Obrázek 17: Schéma trojitého kvadrupólu při skenu neutrální ztráty [44]	22
Obrázek 18 Schéma trojitého kvadrupólu při sledování rozpadu iontu [44]	22
Obrázek 19 Schéma fungování dynodového násobiče elektronů [44]	23
Obrázek 20 Schéma mechanismu headspace [49]	24
Obrázek 21 Charakteristika SPME vlákna [51]	25
Obrázek 22 Fáze vláken SPME a jejich přidružené polarity [51]	26
Obrázek 23 Fáze vláken SPME a jejich materiálové vlastnosti [51]	26

SEZNAM TABULEK

Tabulka 1 Procentuální zastoupení sloučenin v esenciálním oleji	16
Tabulka 2 Nastavení teplotního programu 1 GC	31
Tabulka 3 Nastavení teplotního programu 2 GC	32
Tabulka 4 Majoritní složky BIO kurkumy stanovené pomocí HS-SPME-GC/MS	44
Tabulka 5 Seznam analyzovaných látek v BIO kurkumě s názvem sloučeniny, retenčním časem, relativní plochou píku (area %), absolutní plochou píku (area) a procentuální shodou hmotnostního spektra s knihovnou spekter (SI-similarity index)	47
Tabulka 6 Majoritní složky sušené kurkumy stanovené pomocí HS-SPME-GC/MS	48
Tabulka 7 Seznam analyzovaných látek v sušené kurkumě s názvem sloučeniny, retenčním časem, relativní plochou píku (area %), absolutní plochou píku (area) a procentuální shodou hmotnostního spektra s knihovnou spekter (SI-similarity index)	51
Tabulka 8 Majoritní složky sušené kurkumy stanovené pomocí HS-SPME-GC/MS	52
Tabulka 9 Seznam analyzovaných látek v čerstvé kurkumě s názvem sloučeniny, retenčním časem, relativní plochou píku (area %), absolutní plochou píku (area) a procentuální shodou hmotnostního spektra s knihovnou spekter (SI-similarity index)	55
Tabulka 10 Seznam sloučenin napříč vzorky, jejich plochy píku a strukturní vzorce	56

SEZNAM GRAFŮ

Graf 1 Srovnání akrylového a DVB/Carbon WR/PDMS vlákna při analýze bio kurkumy	34
Graf 2 Srovnání akrylového a DVB/Carbon WR/PDMS vlákna při analýze sušené kurkumy	35
Graf 3 Srovnání akrylového a DVB/Carbon WR/PDMS vlákna při analýze čerstvé kurkumy	35
Graf 4 Srovnání vzorků biokurkumy s přidavkem NaCl a bez přidavku	36
Graf 5 Srovnání vzorků sušené kurkumy s přidavkem NaCl a bez přidavku	37
Graf 6 Srovnání vzorků čerstvé kurkumy s přidavkem NaCl a bez přidavku	37
Graf 7 Srovnání vzorků bio kurkumy – navážka 0.1/0,05/0,025 g	38
Graf 8 Srovnání vzorků sušené kurkumy – navážka 0.1/0,05/0,025 g	39
Graf 9 Srovnání vzorků čerstvé kurkumy – navážka 0.3/0,2/0,1 g	39
Graf 10 Srovnání vzorků BIO kurkumy – Teplotní program 1	40
Graf 11 Srovnání vzorků sušené kurkumy – Teplotní program 1	41
Graf 12 Srovnání vzorků čerstvé kurkumy – Teplotní program 1	41
Graf 13 Srovnání vzorků BIO kurkumy – Teplotní program 2	42
Graf 14 Srovnání vzorků sušené kurkumy – Teplotní program 2	43
Graf 15 Srovnání vzorků čerstvé kurkumy – Teplotní program 2	43
Graf 16 Chromatogram analýzy BIO kurkumy	45
Graf 17 Chromatogram (14–34) analýzy BIO kurkumy s vyznačenými píky	45
Graf 18 Chromatogram (50–66) analýzy BIO kurkumy s vyznačenými píky	46
Graf 19 Chromatogram (67–77) analýzy BIO kurkumy s vyznačenými píky	46
Graf 20 Chromatogram analýzy sušené kurkumy	49
Graf 21 Chromatogram (14–27) analýzy sušené kurkumy s vyznačenými píky	49
Graf 22 Chromatogram (30–50 min) analýzy sušené kurkumy s vyznačenými píky	50
Graf 23 Chromatogram (51–77) analýzy sušené kurkumy s vyznačenými píky	50
Graf 24 Chromatogram analýzy čerstvé kurkumy	53
Graf 25 Chromatogram (10–30) analýzy čerstvé kurkumy s vyznačenými píky	53
Graf 26 Chromatogram (50–78) analýzy čerstvé kurkumy s vyznačenými píky	54

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

HS-SPME	Headspace solid phase microextraction (mikroextrakce z pevné fáze v prostoru nad vzorkem)
GC-MS	Gas Chromatography-Mass Spectrometry (plynová chromatografie s hmotnostní spektrometrií)
BIO	Biologicky pěstovaná (označení typu vzorku)
SB	Sbírka zákonů
E100	Kód potravinářské přídatné látky (kurkumin)
PDMS	Polydimethylsiloxan
DVB	Divinylbenzen
TCD	Thermal Conductivity Detector (detektor tepelné vodivosti)
ECD	Electron Capture Detector (detektor záchytu elektronů)
FID	Flame Ionization Detector (plamenový ionizační detektor)
MS	Mass Spectrometry (hmotnostní spektrometrie)
SI	Similarity Index (index shody spektra)
PTFE	Polytetrafluorethylen
m/z	Poměr hmotnosti ku náboji

