

STANOVENÍ TĚKAVÝCH LÁTEK V PARFÉMECH

Hlavním cílem předložené diplomové práce bylo vypracování metody pro identifikaci co největšího počtu látek obsažených v surovinách pro výrobu parfémů, popřípadě v parfémech samotných. Diplomová práce je po experimentální i obsahové stránce přiměřeně rozsáhlá.

V teoretické části diplomantka zpracovala rešerši týkající se vonných olejů, jejich složení, biosyntézy a získávání z přírodních matric. Dále jsou uvedeny různé postupy analýzy vonných látek se zaměřením na možnosti plynové chromatografie jako analytické koncovky. Rešerše je přehledná a srozumitelná s dostatečným výčtem citací odborné literatury.

V praktické části diplomantka prezentuje výsledky analýz čtyř vzorků parfémů a surovin pro výrobu parfémů pomocí multidimenzionální plynové chromatografie. Na základě chromatografické separace na nepolární koloně v první dimenzi byly vybrány jednotlivé frakce, které byly dále děleny na dvou typech chirálních kolon v druhé dimenzi, přičemž pro identifikaci látek byl použit hmotnostní spektrometr.

Práce má přehledné členění a svým uspořádáním působí vcelku uceleným dojmem.

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

Str. 27, poslední odstavec: co znamená pojem „Deans“?

Str. 29, poslední odstavec: co je „flue-cured“ tabák a „Burley“ tabák, jaký je mezi nimi rozdíl? Dále se domnívám, že „orientální tabák“ je ve skutečnosti tabáková odrůda Oriental.

Str. 30, kapitola 4.2.2, 2. odstavec: GC experimentů se nedosahuje, GC experimenty se provádí.

Str. 31, 5. odstavec: detekovány nejsou píky, ale sloučeniny.

Str. 32, předposlední odstavec: citace Bayer a kol. [23] odkazuje na jinou publikaci (Schomburg a kol.)

Str. 38, Tabulka 1: terpinen-4-ol má s knihovnou spekter poměrně nízkou shodu. Bylo nějakým způsobem ověřeno (např. zpětným vyhledáním diagnostických iontů terpinen-4-olu na příslušném retenčním čase), zda se skutečně jedná o danou sloučeninu? V jednotlivých „heart-cut“ již identifikován nebyl, což nasvědčuje tomu, že se v daném případě nemuselo jednat o terpinen-4-ol. Přesto je tato sloučenina vyjmenována mezi identifikovanými ve vzorku Praga Alchymica (Tabulka 47 na straně 86).

Str. 38, Tabulka 1: je uvedeno, že v chromatogramu 2D „heart-cut“ 11,25-31,56 (Obrázek 6b) byly identifikovány mimo jiné i sloučeniny beta-felandren, trans-geraniol a hydroxycitronellal. V analýzách jednotlivých frakcí nebyly tyto tři sloučeniny již identifikovány i přesto, že příslušné píky z chromatogramu 2D na Obrázku 6b) měly dobrou shodu s knihovnou spekter. Čím si vysvětlujete, že tyto tři sloučeniny nebyly v jednotlivých frakcích identifikovány? Přesto jsou tyto sloučeniny vyjmenovány mezi identifikovanými ve vzorku Praga Alchymica (Tabulka 47 na straně 86).

Str. 41, Tabulka 4: u sloučenin bergamoten a santen jsou shody s knihovnou spekter poměrně nízké (což je také uvedeno v textu na stejné straně). Bylo nějakým způsobem ověřeno, zda se skutečně jedná o danou sloučeninu? (např. již zmiňovaným zpětným vyhledáním diagnostických iontů dané sloučeniny na příslušném retenčním čase)

Str. 55, Tabulka 18: shoda s knihovnou spekter je pod 80%. Bylo ověřeno, že se jedná o danou sloučeninu? Stejně tak v tabulkách 20 (str. 57), 24 (str. 61), 27 (str. 64), 31 (str. 68), 38 (str. 75) a 46 (str. 83).

Str. 58, Tabulka 21: při analýze vzorku Rose Josefina (metoda 1) byly z „širokého heart-cut“ identifikované mimo jiné sloučeniny citral a citronellyl acetát, které jsou uvedeny i v souhrnné Tabulce 52 (str. 91) a přitom v jednotlivých frakcích nebyly vůbec identifikovány. Stejně je to v případě vzorku Rose Taif (metoda 2) – sloučeniny beta-citronellyl acetát, cis-geranyl acetát a trans-geranyl acetát (Tabulky 40 a 52 vs. analýzy jednotlivých frakcí).

Str. 86-91, Tabulky 47-52: asi není nutné uvádět retenční časy z druhé dimenze u jednotlivých identifikovaných sloučenin. Když už jsou uvedeny, tak by mělo být také uvedeno, ke kterému „heart-cut“ příslušný retenční čas s danou sloučeninou patří.

Do další diskuse vznáším na diplomantku následující dotaz:

Podle názvu vzorků usuzuji, že se jedná o materiály odvozené od růžových olejů. Jsou identifikované látky obvykle přítomné v těchto olejích, nebo byly identifikovány i látky, které se v těchto olejích běžně nevyskytují?

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

– velmi dobře –

V Pardubicích dne 23. května 2014



Ing. Tomáš Bajer, Ph.D.

Oponent diplomové práce