

UNIVERZITA PARDUBICE
FAKULTA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ

DIPLOMOVÁ PRÁCE

2019

Bc. Klára Krejčíková

Univerzita Pardubice

Fakulta chemicko-technologická

Analýza ovocných destilátů

Bc. Klára Krejčíková

Diplomová práce

2019

Univerzita Pardubice
Fakulta chemicko-technologická
Akademický rok: 2018/2019

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Bc. Klára Krejčíková**
Osobní číslo: **C17517**
Studijní program: **N1407 Chemie**
Studijní obor: **Analytická chemie**
Název tématu: **Analýza ovocných destilátů**
Zadávací katedra: **Katedra analytické chemie**

Zásady pro vypracování:

1. Proveďte literární rešerši zaměřenou na ovocné destiláty, zaměřte se hlavně na výrobu, vlastnosti a hodnocení kvality.
2. V experimentální části analyzujte pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační detekcí profily těkavých látek jednodruhových ovocných destilátů vyrobených z jablek, hrušek, švestek, mirabelek a meruněk. Prověřte možnost použití získaných aromaprofilů jako "fingerprint" pro rozdělení testovaných destilátů podle druhu ovoce. Dále proveďte pomocí plynové chromatografie s hmotnostní detekcí analýzu těkavých látek méně obvyklých druhů destilátů s cílem identifikace co možná největšího počtu složek.

Rozsah grafických prací:

Rozsah pracovní zprávy:

Forma zpracování diplomové práce: **tištěná**

Seznam odborné literatury:

Podle pokynů vedoucího práce.

Vedoucí diplomové práce:

Ing. Tomáš Bajer, Ph.D.

Katedra analytické chemie

Konzultant diplomové práce:

doc. Ing. Petra Bajerová, Ph.D.

Katedra analytické chemie

Datum zadání diplomové práce: **5. února 2019**

Termín odevzdání diplomové práce: **9. května 2019**



prof. Ing. Petr Kalenda, CSc.
děkan

L.S.



prof. Ing. Karel Ventura, CSc.
vedoucí katedry

Prohlašuji:

Tuto práci jsem vypracovala samostatně. Veškeré literární prameny a informace, které jsem v práci využila, jsou uvedeny v seznamu použité literatury.

Byl jsem seznámena s tím, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorský zákon, zejména se skutečností, že Univerzita Pardubice má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona, a s tím, že pokud dojde k užití této práce mnou nebo bude poskytnuta licence o užití jinému subjektu, je Univerzita Pardubice oprávněna ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které na vytvoření díla vynaložila, a to podle okolností až do jejich skutečné výše.

Beru na vědomí, že v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších předpisů, a směrnicí Univerzity Pardubice č. 9/2012 Pravidla pro zveřejňování závěrečných prací a jejich základní jednotnou formální úpravu, ve znění pozdějších dodatků, bude práce zveřejněna v Univerzitní knihovně a prostřednictvím Digitální knihovny Univerzity Pardubice.

V Pardubicích dne 18. 4. 2019

Bc. Klára Krejčíková

PODĚKOVÁNÍ:

Ráda bych tímto poděkovala vedoucímu mé diplomové práce Ing. Tomáši Bajerovi, Ph.D. za odborné vedení, věcné připomínky a cenné rady, trpělivost, ochotu a vstřícnost v průběhu celé práce, což mi usnadnilo její vypracování. Děkuji konzultantce doc. Ing. Petře Bajerové, Ph.D. za laskavost a ochotu mi poskytnout cenné rady, kdykoliv jsem potřebovala. Oběma děkuji za jejich pomoc a čas, který mi věnovali. Velké poděkování patří rodině za umožnění studia a jejich materiální podporu a také partnerovi Petrovi za psychickou podporu a trpělivost.

ANOTACE

Diplomová práce je věnována analýze ovocných destilátů. Teoretická část práce je zaměřena na výrobu a složení alkoholických nápojů vyráběných ve světě, zejména na problematiku ovocných destilátů. Popisuje jednotlivé fáze výroby ovocných destilátů, včetně výběru surovin, procesu a podmínek fermentace ovocného kvasu a destilace. Dále se zaměřuje na chemické složení ovocných destilátů, izolaci těkavých látek z ovocného destilátu a následnou chromatografickou a senzorickou analýzu. V poslední části teoretické části popisuje principy statistické analýzy dat, konkrétně ortogonální projekce do latentních struktur a hierarchické analýzy shluků. Experimentální část diplomové práce je věnována analýze jednodruhových ovocných destilátů a speciálních netradičních destilátů pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí. Získané aromaprofilů byly použity jako tzv. „fingerprinty“ pro rozdělení testovaných destilátů podle druhu ovoce. Rozlišení destilátů z jablek, hrušek, švestek, mirabelek a meruněk bylo provedeno pomocí metod ortogonální projekce do latentních struktur a hierarchické analýzy shluků. Druhá část experimentální části práce se zabývala analýzou těkavých látek v netradičních druzích destilátů s cílem získat co nejvíce informací o složení jejich aromaprofilů. Získané výsledky byly porovnány vzájemně a také s dostupnou literaturou.

KLÍČOVÁ SLOVA

Ovocné destiláty, destilace, těkavé látky, headspace mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí, ortogonální projekce do latentních struktur, hierarchická analýza shluků.

TITLE

Fruit spirits analysis

ANNOTATION

The aim of this thesis is analysis of home-made fruit spirits. The theoretical part is focused on alcoholic beverages, especially fruit spirits, their production around the world and chemical composition. Production stages of fruit spirits are defined, including raw material selection, fermentation as well as distillation conditions. Furthermore, this part is dedicated to chemical composition of fruit spirits, isolation of volatile compounds from spirits and their chromatographic and sensoric analysis. The last section of the theoretical part deals with statistical analysis and describes principles of orthogonal projections to latent structures and hierarchical clusters analysis. Experimental part is focused on analysis of single-species fruit spirits and special non-traditional kinds of spirit using gas chromatography with flame-ionization and mass spectrometry detection. Gained fruit spirits aroma profiles were used as „fingerprints“ distinguishing tested spirits by original fruit source. Spirits from apples, pears, plums, mirabelles and apricots were differentiated by the method of orthogonal projections to latent structures and hierarchical clusters analysis. Second section of experimental part aimed on volatile compounds analysis in non-traditional kinds of spirits in order to gain as much information as possible about volatile compounds in aroma profiles. Acquired results were compared to each other along with available literature.

KEYWORDS

Fruit spirits, distillation, volatile compounds, headspace solid-phase microextraction, gas chromatography with flame-ionization and mass spectrometry detection, orthogonal projections to latent structures, hierarchical clusters analysis.

OBSAH

| | |
|--|----|
| ÚVOD..... | 15 |
| 1 TEORETICKÁ ČÁST | 16 |
| 1.1 Historie výroby ovocných destilátů | 16 |
| 1.2 Alkoholické nápoje ve světě | 17 |
| 1.2.1 Whisky | 18 |
| 1.2.2 Brandy a destiláty z vinné šťávy..... | 19 |
| 1.2.3 Obilné destiláty | 19 |
| 1.2.4 Rum, tequila a další destiláty | 20 |
| 1.2.5 Ovocné destiláty | 22 |
| 1.2.5.1 Destiláty z peckovin | 22 |
| 1.2.5.2 Destiláty z jádrového ovoce | 24 |
| 1.3 Výroba ovocných destilátů..... | 24 |
| 1.3.1 Suroviny..... | 25 |
| 1.3.2 Předúprava ovoce..... | 25 |
| 1.3.3 Zakvácení | 26 |
| 1.3.4 Kvašení (fermentace)..... | 27 |
| 1.3.4.1 Kvasinky..... | 28 |
| 1.3.4.2 Vliv pH | 29 |
| 1.3.4.3 Vliv teploty na kvašení | 29 |
| 1.3.4.4 Pektolýza - enzym ztekucující kvas | 29 |
| 1.3.4.5 Měření obsahu alkoholu v kvasu | 30 |
| 1.3.4.6 Měření obsahu cukru v kvasu..... | 30 |
| 1.3.5 Destilace..... | 30 |
| 1.3.5.1 Průběh destilace | 31 |
| 1.3.5.2 Destilační frakce (úkap, prokap, dokap)..... | 32 |
| 1.3.5.3 Destilační zařízení | 33 |

| | | |
|---------|---|----|
| 1.3.5.4 | Finalizace produktu | 35 |
| 1.3.5.5 | Skladování destilátu..... | 36 |
| 1.4 | Chemické složení ovocných destilátů | 36 |
| 1.4.1 | Alkoholy | 37 |
| 1.4.2 | Karbonylové sloučeniny | 38 |
| 1.4.3 | Kyseliny a jejich funkční deriváty | 38 |
| 1.5 | Extrakce těkavých látek z ovocných destilátů | 40 |
| 1.5.1 | Extrakce kapalina-kapalina..... | 40 |
| 1.5.2 | Extrakce tuhou fází | 41 |
| 1.5.3 | Mikroextrakce tuhou fází..... | 41 |
| 1.5.4 | Sorpční extrakce na míchadle | 43 |
| 1.5.5 | Mikroextrakce jednou kapkou | 44 |
| 1.6 | Analýzy těkavých látek | 46 |
| 1.6.1 | Plynová chromatografie..... | 46 |
| 1.7 | Senzorická analýza ovocných destilátů..... | 48 |
| 1.7.1 | Olfaktometrická analýza | 48 |
| 1.7.2 | Hodnocení ovocných destilátů podle chuti a vůně | 49 |
| 1.8 | Statistická analýza dat | 50 |
| 1.8.1 | Ortogonální projekce do latentních struktur | 50 |
| 1.8.2 | Shluková analýza | 51 |
| 1.8.2.1 | Hierarchická analýza shluků..... | 51 |
| 2 | EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST | 54 |
| 2.1 | Vzorky a chemikálie | 54 |
| 2.1.1 | Příprava vzorků ovocných destilátů..... | 54 |
| 2.1.2 | Použité chemikálie..... | 54 |
| 2.2 | Mikroextrakce tuhou fází v headspace uspořádání | 56 |
| 2.3 | Plynová chromatografie | 56 |

| | | |
|---------|--|-----|
| 2.3.1 | Podmínky plamenově-ionizační detekce | 57 |
| 2.3.2 | Podmínky hmotnostního spektrometru | 57 |
| 2.4 | Vyhodnocení chromatografických dat | 57 |
| 2.4.1 | Identifikace těkavých látek ve speciálních destilátech | 57 |
| 2.4.2 | Vyhodnocení dat pro statistické rozlišení destilátů | 58 |
| 3 | VÝSLEDKY A DISKUZE | 60 |
| 3.1 | Analýza aromaprofilu těkavých látek ve speciálních druzích destilátů | 60 |
| 3.1.1 | Diskuze a porovnání složení vybraných druhů destilátů | 74 |
| 3.1.1.1 | Porovnání profilů těkavých látek z hlediska skupin látek | 74 |
| 3.1.1.2 | Nejvýznamnější sloučeniny z jednotlivých skupin látek..... | 75 |
| 3.1.1.3 | Složení aromaprofilů destilátů podle zastoupení jednotlivých sloučenin ... | 77 |
| 3.1.2 | Časová změna profilu těkavých látek v destilátu..... | 89 |
| 3.2 | Rozlišení druhu ovocných destilátů na základě statistické analýzy profilu těkavých látek | 92 |
| 3.2.1 | Ortogonální projekce do latentních struktur | 92 |
| 3.3 | Ověření správnosti metody OPLS k rozlišení druhu ovocných destilátů | 102 |
| 3.3.1 | Hierarchická analýza shluků | 106 |
| 4 | ZÁVĚR | 108 |
| 5 | POUŽITÁ LITERATURA | 112 |
| 6 | PŘÍLOHY | 122 |

SEZNAM OBRÁZKŮ

| | |
|---|-----|
| Obrázek 1: Rozdělení alkoholických nápojů (převzato z [6])..... | 17 |
| Obrázek 2: Destilační zařízení pro jednostupňovou destilaci kvasu (převzato z [56])..... | 35 |
| Obrázek 3: Schéma sorpční extrakce na míchadle. Zleva: extrakce z kapalného vzorku a headspace prostoru (převzato z [89])..... | 44 |
| Obrázek 4: Schéma mikroextrakce jednou kapkou. Zleva: Vzorkování z kapalného vzorku, odběr vzorku z headspace prostoru nad vzorkem (převzato z [94])..... | 45 |
| Obrázek 5: Schematické zapojení plynového chromatografu s olfaktometrickou detekcí (převzato z [108]). | 49 |
| Obrázek 6: Ukázka dendrogramu (převzato z [126])..... | 52 |
| Obrázek 7: Aromaprofil těkavých látek zastoupených ve speciálních druzích destilátů, ve formě bublinového grafu (mandlovice, ořechovice, bezovice, bezinkovice, dýňovice, žitná, malinovice)..... | 72 |
| Obrázek 8: Aromaprofil těkavých látek zastoupených ve speciálních druzích destilátů, ve formě bublinového grafu (pampeliškovice, vínovice, višňovice 1 a 2). | 73 |
| Obrázek 9: Graf komponenty 2 v závislosti na komponentě 1, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce. | 96 |
| Obrázek 10: Graf komponenty 4 v závislosti na komponentě 1, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce. | 97 |
| Obrázek 11: Graf komponenty 4 v závislosti na komponentě 3, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce. | 98 |
| Obrázek 12: Závislost predikovaných hodnot LLR na pozorovaných hodnotách LLR, zleva pro: hruškovice, jablkovice, meruňkovice, mirabelkovice a slivovice (pracovní model)..... | 101 |
| Obrázek 13: Závislost predikovaných hodnot LLR na pozorovaných hodnotách, zleva pro: hruškovice, jablkovice, meruňkovice, mirabelkovice a slivovice (predikční soubor)..... | 105 |
| Obrázek 14: Dendrogram, podobnost profilů těkavých látek v ovocných destilátech..... | 107 |

SEZNAM TABULEK

| | |
|--|----|
| Tabulka 1: Označení ovocných destilátů pro statistickou analýzu (vzorky označené „*“ byly pokládány za neznámé při ověřování schopnosti predikce vypracovaného statistického modelu - kap. 3.3)..... | 55 |
| Tabulka 2: Retenční časy <i>n</i> -alkanů a k nim vypočtené retenční indexy..... | 58 |
| Tabulka 3: Celkové zastoupení jednotlivých skupin látek v aromaprofilech různých druhů destilátů (skupiny látek označené symbolem „-“, nebyly v daném vzorku identifikovány; celkové relativní zastoupení skupin sloučenin se symbolem „stopy“ označuje hodnotu $\leq 0,01$ rel. %). | 62 |
| Tabulka 4: Přehled těkavých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů (sloučeniny označené symbolem „-“, nebyly v daném vzorku identifikovány; relativní zastoupení sloučeniny se symbolem „stopy“ označuje hodnotu $\leq 0,01$ rel. %). | 63 |
| Tabulka 5: Charakterizace OPLS prediktivních komponent na základě korelačních koeficientů jednotlivých závisle proměnných pro jednotlivé komponenty..... | 93 |
| Tabulka 6: Hladiny variability mezi predikovanou proměnnou a prediktory vysvětlené OPLS modelem (celková variabilita vysvětlená modelem je 92,7 %). | 94 |

SEZNAM PŘÍLOH

| | | |
|-------------|--|-----|
| Příloha 1: | Graf komponenty 3 v závislosti na komponentě 1, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce. | 122 |
| Příloha 2: | Graf komponenty 3 v závislosti na komponentě 2, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce. | 123 |
| Příloha 3: | Graf komponenty 4 v závislosti na komponentě 2, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce. | 124 |
| Příloha 4: | Hodnoty logaritmů pravděpodobnostního poměru pro pozorované a predikované objekty (predikční soubor). | 125 |
| Příloha 5: | Chromatogram z GC-FID analýzy destilátu z květu černého bezu. | 128 |
| Příloha 6: | Chromatogram z GC-FID analýzy bezinkového destilátu. | 129 |
| Příloha 7: | Chromatogram z GC-FID analýzy žitného destilátu. | 130 |
| Příloha 8: | Chromatogram z GC-FID analýzy pampeliškového destilátu. | 131 |
| Příloha 9: | Chromatogram z GC-FID analýzy malinového destilátu. | 132 |
| Příloha 10: | Chromatogramy z GC-MS analýzy malinového destilátu před a po uskladnění. | 133 |

SEZNAM ZKRATEK A ZNAČEK

| | |
|-----------------------|---|
| CAR | Carboxen |
| CAS | Identifikační číslo látky (Chemical Abstract Services) |
| DCM | Dichlormethan |
| DES | Diethyl sulfid |
| DMDS | Dimethyl disulfid |
| DMS | Dimethyl sulfid |
| DVB | Divinylbenzen |
| EI | Elektronová ionizace (Electron Ionization) |
| FID | Plamenově-ionizační detektor (Flame-Ionization Detector) |
| GC | Plynová chromatografie (Gas Chromatography) |
| GC-ECD | Plynová chromatografie s detekcí elektronového záchytu (Gas Chromatography-Electron Capture Detektor) |
| GC-FPD | Plynová chromatografie s plamenově-fotometrickou detekcí (Gas Chromatography-Flame-Photometric Detektor) |
| GC-MS | Plynová chromatografie s hmotnostní detekcí (Gas Chromatography-Mass spectrometry) |
| HCA | Hierarchická analýza shluků (Hierarchical Cluster Analysis) |
| HS-SBSE | Headspace sorpční extrakce na míchadle (Headspace Stir-Bar Sorptive Extraction) |
| HS-SDME | Headspace mikroextrakce jednou kapkou (Headspace Single Drop Microextraction) |
| HS-SPME | Headspace mikroextrakce tuhou fází (Headspace Solid-Phase Microextraction) |
| HS-SPME/GC-MS | Headspace mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií s hmotnostní detekcí (Headspace Solid-Phase Microextraction/ Gas Chromatography-Mass Spectrometry) |
| HS-SPME/GC-FID | Headspace mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií s plamenově-ionizační detekcí (Headspace Solid-Phase Microextraction/ Gas Chromatography-Flame-Ionization Detector) |
| LLE | Extrakce kapalina-kapalina (Liquid-Liquid Extraction) |
| LLR | Logaritmus pravděpodobnostního poměru (Logarithm of the Likelihood Ratio) |
| MS | Hmotnostní spektrometrie (Mass Spectrometry) |
| OPLS | Ortogonální projekce do latentních struktur (Orthogonal Projections to Latent Structures) |
| PDMS | Polydimethylsiloxan |
| PEG | Polyethylen |
| PLS | Projekce do latentních struktur (Projections to Latent Structures) |
| RI | Retenční indexy (Retention Indices) |
| SBSE | Sorpční extrakce na míchadle (Stir-Bar Sorptive Extraction) |
| SDME | Mikroextrakce jednou kapkou (Single Drop Microextraction) |
| SPE | Extrakce tuhou fází (Solid-Phase Extraction) |
| SPME | Mikroextrakce tuhou fází (Solid-Phase Microextraction) |
| SPME/GC-FID | Mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií s plamenově-ionizační detekcí (Solid-Phase Microextraction/ Gas Chromatography-Flame-Ionization Detector) |
| SPME/GC-MS | Mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií s hmotnostní detekcí (Solid-Phase Microextraction/ Gas Chromatography-Mass Spectrometry) |
| VOC | Těkavé organické sloučeniny (Volatile Organic Compound) |

ÚVOD

Alkoholické nápoje zahrnují skupinu fermentovaných nápojů, do kterých řadíme piva a vína, a skupinu destilovaných alkoholických nápojů, z nichž můžeme jmenovat whisky, gin, tequila nebo ovocné destiláty. Produktů lihového kvašení využívá lidstvo už od pradávna. Nejprve lidé vyráběli samovolným kvašením lahodné nápoje, které dochucovali pomocí bylin nebo ovoce, ale až daleko později objasnil Gay-Lussac princip lihového kvašení. Až do dnešní doby jsou po celém světě získávány alkoholické destiláty pomocí destilace fermentovaných přírodních materiálů.

Ovocné destiláty jsou považovány za alkoholické nápoje s vysokým obsahem alkoholu a ve většině případů se jedná o čiré lihoviny charakteristické svou ovocnou vůní. Jsou populární po celém světě, avšak jejich výroba je soustředěna hlavně do zemí střední a východní Evropy, kde se již jedná o historickou tradici. Nejčastěji se vyrábí z hrušek, švestek, třešní, meruněk, nebo jablek. Chuť a aroma výsledného produktu se odvíjí od použitých surovin, způsobu a podmínkách fermentace a destilace. Proces výroby je zdoluhavý, avšak ne složitý. Zahrnuje přípravu ovocného rmutu drcením ovoce tak, aby došlo k uvolnění šťávy, fázi kvašení, kdy dochází k enzymatickému štěpení cukrů ve prospěch ethanolu. Po skončení kvašení se kvas destiluje v destilační koloně a vzniklý destilát se shromažďuje v několika frakcích, tak aby se docílilo co nejlepší chuti destilátu. Z pohledu chemického složení jsou ovocné destiláty složité směsi těkavých látek, které jsou svým složením jedinečné pro dané ovoce a definují pak typické aroma, chuť a vzhled destilátu.

Cílem této práce bylo analyzovat profily těkavých látek vzorků jednodruhových a netradičních destilátů pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí. Úkolem bylo ověřit, zda aromaprofily těkavých látek v jednodruhových destilátech lze použít jako tzv. „fingerprint“ k jejich rozlišení podle druhu ovoce. Cílem analýzy netradičních destilátů byla identifikace co největšího počtu složek v aromaprofilu.

1 TEORETICKÁ ČÁST

V teoretické části diplomové práce bude popsána historie, výroba alkoholických nápojů, resp. ovocných destilátů a jejich chemické složení. Dále bude tato kapitola věnována principům a využití metod izolace těkavých látek z ovocných destilátů a také jejich chromatografické a senzorické analýze. V poslední části budou diskutovány statistické metody pro zpracování chromatografických dat.

1.1 Historie výroby ovocných destilátů

Vůbec první zmínky o destilaci pochází od řeckého filozofa Aristotela, který vyslovil, že „mořská voda může být destilací učiněna pitnou“. První civilizace využívaly destilaci k výrobě medicínských prostředků a parfémů [1].

Produktů lihového kvašení využívá lidstvo už od pradávna. Nejstarší zmínka o výrobě vína, piva a octa pochází od Babyloňanů (7000 let př. n. l.). Staří Číňané (800 let př. n. l.) vytvořili unikátní destilát z rýže, zvaný arak. Samovolným kvašením ovocných šťáv lidé získávali lahodné nápoje, ve kterých postupně začali macerovat různé drogy a byliny. Téměř do konce 18. stol. nebyl znám pravý mechanismus kvasných procesů na ovoci. Lidé přisuzovali působení kvasinek činnosti bohů a nadpřirozených sil. Podle archeologických a historických výzkumů pochází první zmínky o destilaci prokvašených ovocných šťáv ze starověkého Egypta a Číny. Zkoumáním lihových produktů se zabývali alchymisté a lékárníci, kteří je používali k léčení nemocných a přípravě sladkých likérů. Postupným vývojem se lihové destiláty zakoncentrovaly opakovanou destilací nebo odvodňováním lihu pomocí vápna. Řecký lékař Claudius Galen (r. 130 př. n. l.) popsal proces umožňující uvolnění aromatických látek z rostlin pomocí destilace. Avansoar (r. 1160 n. l.) se zabýval získáním vonných látek a esenciálních olejů destilací. Z dostupných materiálů nelze jednoznačně určit počátky výroby ovocných destilátů [1, 2]. První, kdo popsal alkoholové kvašení rovnicí, byl Gay-Lussac v roce 1800. Rovnici sestavil tak, že z jedné molekuly cukru vznikají dvě molekuly ethanolu a dvě molekuly oxidu uhličitého [2, 3]. V roce 1857, Louis Pasteur prokázal, že lihové kvašení je anaerobní proces a je způsoben živými mikroorganismy. První písemné zmínky o výrobě pálenek na našem území pochází ze 13. a 14. století. K rozvoji pálenek, především z vinné révy, došlo za vlády Jana Lucemburského a Karla IV. Z konce 14. století pocházejí zápisy o pálení zkvašeného obilí, hlavně výrobě žitné pálenky. Dochované dokumenty dokládají, že v 15. století se ve Vizovicích odváděly poplatky za pálení švestkových kvasů [2].

Výroba alkoholických nápojů ve světě se vyvíjela už od 12. století, a to konkrétně v Rusku, kde se začala z obilného kvasu destilovat vodka. Naproti tomu první písemný záznam o výrobě skotské sladové whisky pochází až roku 1494. Daleko později, až v 16. století došlo k vývoji i jiných alkoholických nápojů jako např. tequila (Mexiko), cachaça (Brazílie) a koňak (Francie). Velmi vyspělý rumový průmysl provozovaný otroky v západní Indii byl produktivní až v 17. století. Taktéž v 17. a 18. století začala výroba ginu v Holandsku. Postupem času byly na světovém trhu lokalizovány další maloobjemové produkce alkoholických destilátů, jako je aquavit (Dánsko), arak (Turecko), grappa (Itálie), marc (Francie) nebo ouzo (Řecko). Maloobjemová výroba destilátů byla zaznamenána i mimo Evropu, a to v Jižní a Střední Americe, kde se destiláty vyráběly pod názvem pisco a mezcal. Čína se proslavila destilátem maotai, jež je vyrobený ze speciálního druhu obilí [3, 4].

1.2 Alkoholické nápoje ve světě

Alkoholické nápoje typicky obsahují mezi 1 až 76 obj. % alkoholu. Nápoje s obsahem vyšším než 76 obj. % alkoholu se označují jako léčiva, např. anestetika. Alkoholické nápoje jsou kategorizovány v závislosti na použitých surovinách nebo obsahu ethanolu, jak je uvedeno na obrázku 1. Obecně je lze klasifikovat na piva, vína a destilované alkoholické nápoje [5].



Obrázek 1: Rozdělení alkoholických nápojů (převzato z [6]).

Alkoholické nápoje se rozdělují do dvou kategorií podle obsahu ethanolu, a to na destilované lihoviny a likéry. Destilované lihoviny obsahují nejčastěji mezi 30 až 50 obj. % alkoholu a jsou získávány destilací z produktů fermentačních procesů. Jejich chuť se odvíjí jak od kvasné suroviny, tak i od podmínek fermentace, destilace nebo skladování produktu. Druhou skupinou jsou likéry a nápoje s minimálním obsahem alkoholu 15 obj. % a obsahem cukru 100 g/l. Ty jsou produkovány aromatizací ethanolu, získaného destilací zemědělských

plodin. V takto získaném ethanolu mohou být macerovány byliny nebo ovoce, které uvolňují aromatické látky. K aromatizaci ethanolu se mohou používat i esenciální oleje nebo přírodní extrakty [7].

Po celém světě jsou destilované alkoholické nápoje získávány destilací fermentovaných přírodních materiálů, jež jsou charakteristické pro danou oblast. Nejdůležitějším kritériem kvality a autentičnosti destilátu je složení a chuť. Tyto vlastnosti jsou typickým odrazem přírodního materiálu použitého pro fermentaci a následnou destilaci [7]. Tato kapitola se zabývá jednotlivými druhy destilovaných alkoholických nápojů a jejich specifickým složením.

1.2.1 Whisky

Whisky je jednou z nejoblíbenějších lihovin vyrobených z obilovin. V Evropě je whisky definována jako lihovina vyrobená destilací fermentu z drcených sladových zrn nebo obilných zrn sacharifikovaných diastázou. Diastáza enzymaticky rozkládá škrob na jednoduché cukry. Hlavní surovinou pro výrobu whisky je ječmen, ke kterému se v menším množství přidává pšenice nebo žito. Po destilaci produkt dozrává alespoň 3 roky v dřevěných sudech, kde dochází k nárůstu obsahu aromatických látek, což zjemňuje chuť surového produktu [8-10].

Whisky je vyráběna po celém světě. K nejznámějším patří skotská, americká, kanadská, irská a japonská whisky, které se liší surovinou, způsobem výroby i dobou stárnutí v dřevěných sudech. Například skotská a irská whisky jsou vyrobeny z podobných surovin, avšak s tím rozdílem, že irská whisky je destilovaná třikrát, zatímco skotská pouze dvakrát. Trojí destilací vzniká méně výrazná lihovina, která dobře zraje [9, 11-14]. Další zajímavostí je názvosloví, v Irsku a Americe je zažitý název whiskey, kdežto ve Skotsku a ostatních zemích je to whisky. Existují dva druhy whisky, a to sladová (jednodruhová) a míchaná. Známější je sladová whisky, která je vyráběna pouze z vody, ječmene a kvasinek. Typická kouřová chuť skotské sladové whisky je způsobena přítomností fenolických látek, vznikajících v důsledku spalování rašeliny v peci při sušení ječmene. Mezi aromatické sloučeniny zodpovědné za kouřovou chuť se řadí krezoly, guajakol, ethylfenol a vinylguajakol. Míchaná skotská whisky se od ostatních odlišuje tím, že výsledný produkt se míchá z obilné whisky, vyrobené kontinuální destilací, a sladové whisky, která je dvakrát destilovaná. Spojení těchto dvou druhů se využívá k docílení jednotnosti produktu, požadované barvy a chuti [7, 14, 15]. Dalším druhem je bourbon whiskey, vyráběná v USA ze směsi obilí, s obsahem minimálně 51 % kukuřice. Směs kukuřice, žita a sladového ječmene je fermentována po dobu 2 až 4 dní.

Po destilaci zraje bourbon v dubových sudech minimálně po dobu 2 let, což mu dodává typicky jantarovou barvu [8, 16]. Jack Daniels neboli Tennessee Whiskey je název pro bourbon, který je filtrován přes třímetrovou vrstvu dřevěného uhlí [8].

Whisky obsahuje velké množství aromatických látek, jako jsou vyšší alkoholy a fenoly, ethylenové a isoamylové estery, acetáty, mastné kyseliny, ketony a monoterpeny, které pocházejí buď přímo ze suroviny, nebo vznikají v průběhu fermentace nebo destilace [17].

1.2.2 Brandy a destiláty z vinné šťávy

Brandy, jehož název je odvozen z holandského slova „brandewijn“ neboli spálené víno, je destilát z vinné révy, který zraje v dubových sudech. Každá vinařská země jako Španělsko, Řecko, Itálie nebo Francie produkuje své brandy s typickým zeměpisným označením. Francouzské brandy se označuje jako „Koňak“ nebo „Armaňak“, v Německu jako „Weinbrand“, ve Španělsku se označuje jako „Brandy de Jezer“ a v ostatních zemích jako Itálie, Mexiko nebo Chile se brandy prodává pod názvem „Pisco“. **Koňak** a **armaňak** patří mezi nejznámější zástupce destilátů vyrobených z bílých hroznů vinné révy. Koňak je produkován kvasinkovou fermentací hroznů a je dvakrát destilován, dokud nedosáhne 70 obj. % alkoholu, zatímco armaňak je fermentován bez přídavku kvasinek a destilace probíhá pouze jednou, dokud nedosáhne 55 obj. % alkoholu [18]. Stárnutí obou destilátů probíhá v dubových sudech minimálně po dobu 6 měsíců. Poté probíhá ředění na 40 obj. % alkoholu. Koňaky mívají ovocně květinovou chuť, a to díky obsahu esterů, zatímco armaňaky vynikají ostřejší chutí [16]. Delší dobou stárnutí se zvyšuje pravděpodobnost možného žluknutí destilátu, z důvodu přeměny mastných kyselin na methylketony [19].

Analýzou brandy pomocí plynové chromatografie s hmotností detekcí bylo zjištěno, že senzorické vlastnosti ovlivňují následující látky, jako diacetyl (máslo), nerolidol (seno), (Z)-3-hexen-1-ol (tráva), 2-fenylethyl acetát (růže), 2-methylbutyl acetát (hruška) a 3-methylbutyl acetát (banán). V závorkách je uvedeno, k čemu je typické aroma zmíněných látek přirovnáno [4, 7].

1.2.3 Obilné destiláty

Mezi další typické destiláty vyráběné z obilí patří vodka a gin. **Vodka** je typickým nápojem Rusů, Finů, Poláků, Švédů a obyvatel východních zemí. Vodka je vyráběna destilací zkvašeného obilí, brambor, řepné melasy nebo jiných zemědělských plodin. Surovinou pro vodu vyráběnou v Rusku, Švédsku a pobaltských zemích je pšenice, zatímco v Polsku se nejčastěji destiluje z žitného kvasu. Melasa, lepkavý a sladký zbytek z výroby cukru, je

široce používaná jako surovina pro výrobu levných značek vodky [7]. Na druhou stranu, při snaze dosáhnout vysoké kvality vodky se svou typicky jemnou chutí se používá filtrace destilátu přes aktivní uhlí, frakcionace a ředění speciálně upravenou vodou [20]. Některé druhy vodky jsou dochucovány ovocem, bylinkami nebo kořením. V Rusku a Polsku se vodky dochucují zejména citrony, pomeranči, zázvorem, kávou, anýzem nebo rybízem [7].

Gin je alkoholický nápoj vyrobený destilací obilného kvasu, dochuceným jalovcem, z něž získává svou typickou chuť. Pro doplnění dalších chutí se může přidávat koriandr, kardamon, pomerančová kůra nebo kořen angeliky lékařské. Obsahuje hlavně terpeny, jejich oxidy a seskviterpeny, jako například limonen, β -myrcen, γ -terpinen nebo α -terpineol, které dodávají ginu specifickou chuť. Hlavní sensorickou vlastností ginu je chuť a vůně jalovce, citrusů, lišejníku a koření [21, 22].

Aquavit je původně skandinávský alkoholický nápoj, vyráběný fermentací brambor a směsi obilovin. Fermentovaná směs je nejprve dvakrát destilována do neutrálního alkoholu a poté ještě jednou s přidavkem aromatických rostlin, jako je anýz nebo kmín [16]. V důsledku toho, je chuť aquavitu podobná ginu [13].

Německý obilný destilát, známý pod názvem **korn** nebo kornbrand, je tradiční alkoholický nápoj vyráběný destilací fermentované kaše z pšenice, ječmene, ova, žita nebo pohanky [7].

1.2.4 Rum, tequila a další destiláty

Rum je lihovina vyrobená destilací fermentované šťávy z cukrové třtiny, melasy nebo jejich směsi. Romy jsou obecně rozdělovány do dvou skupin na světlé (bílé) a tradiční (tmavé) romy. Melasa obsahuje více než 50 % cukru, ale také další látky, které přispívají k typicky rumovému aroma. Vydestilovaný produkt je ředěn obvykle na 60–70 obj. % alkoholu a stárne v dubových sudech, čímž získává svou typicky zlatavou barvu a aroma. V této fázi zrání se do rumu uvolňují různé látky ze dřeva, což má pozitivní vliv na sensorické vlastnosti výsledného produktu [20, 23-25]. Tradiční tmavé romy mají v porovnání se světlými výraznější chuť. Většina tradičních rumů je dnes fermentována po dobu 1 až 2 dnů pomocí kvasinkových kultur kmene *Schizosaccharomyces*. Tyto kvasinky produkují velké množství esterů. Tradiční romy obsahují čtyř až pětinasobně více aromatických sloučenin, v porovnání se světlými romy. Vydestilovaný produkt pak zraje v dřevěných sudech, aby získal typicky karamelovou barvu. Někdy se také přidává karamel na podporu barvy a chuti [13]. Tmavý rum je charakteristický vysokou koncentrací fuselových alkoholů a ethylesterů kyseliny octové, propionové, máselné, valerové a dalších homologů, jež přispívají k jeho výrazné vůni.

Typického zabarvení se rumu dostane pomocí Mallairdovy reakce, tzv. reakce neenzymového zhnědnutí, jež představuje reakci dusíkatých sloučenin se sacharidy [7]. Odlišným způsobem se vyrábí světlé rummy, a to fermentací roztoku melasy za použití kvasinek po dobu 12 až 20 hodin. Poté jsou nepřetržitě destilovány, dokud nedosáhnou 95 obj. % alkoholu. Zrají několik měsíců za účelem zjemnění ostré chuti. Následně jsou ředěny na 43 obj. % alkoholu. Světlé rummy mají obecně kratší dobu zrání a jsou filtrovány přes aktivní uhlí k odstranění veškeré barvy a zjemnění chuti [4, 13].

Tequila a **mezcal** jsou původem mexické lihoviny, které se vyrábí destilací fermentované šťávy z agáve, rostliny čeledi chřestovitých. Surovinou pro výrobu tequily je výhradně agáve modrá (*Agave tequiliana Weber*), avšak mezcal se vyrábí z jiných druhů agáve. Oba tyto destiláty se vyrábí stejným postupem. Plody agáve, připomínající ananas, jsou nejprve rozřezány a pomalu pečený v parních pecích nebo autoklávech, dokud se veškerý škrob nepřeveďte na jednoduché cukry. Plody agáve, z nichž se mezcal vyrábí, jsou pečený v pecích vyhřívaných dřevěným uhlím, čímž získává svou kouřovou chuť. Výsledkem tohoto tepelného procesu je vznik Maillardových sloučenin, jako je 5-hydroxymethyl furfural, 2-furan methanol nebo 2-furan karboxyaldehyd. Z upečených plodů je pak vymačkána šťáva, která dále prochází fermentačními procesy a destilací. Čirý produkt obsahuje velké množství terpenických látek, esterů, fenolů, thiazolů, dále pak aromatické sloučeniny jako isovaleraldehyd, isoamylalkohol, β -damascenon, 2-fenethylalkohol, fenyl acetát nebo eugenol.

Existuje několik druhů tequily. „Bianco“ (bílá, stříbrná) je průzračně čirá a může zrát až 30 dní v dubových sudech, avšak dnes častěji zraje maximálně 60 dní v nerezových nádobách. „Joven abocado“ (zlatá) tequila je mladá a nezralá tequila, která je dobarvena a dochucena karamellem. „Resporado“ tequila zraje 2 až 11 měsíců v dubových tancích, které se obvykle používají na koňak nebo bourbon. Stárnutí dodává produktu lahodnost a vytríbenou chuť. „Añejo“ tequila dozrává nejméně 1 rok v mladých dubových sudech. Doba stárnutí většinou nepřesahuje 4 roky, neboť se z chuti tequily vytrácí její zemitost a agávové aroma [7, 16, 26, 27].

Pálenka s příchutí anýzu, tzv. **anýzovka** je nejčastěji vyráběna v Řecku pod názvem „Ouzo“, v Turecku jako „Raki“ nebo ve Francii známý jako „Pastis“. Tento alkoholický nápoj je vyráběn aromatizací ethanolu zemědělského původu extraktem z anýzu, fenyklu nebo jiných rostlin obsahujících *trans*-anethol, který je hlavní aromatickou složkou anýzu. Anýzový destilát

je bohatý také na *cis*-anethol, estragol, anizaldehyd a anýzový alkohol. Pro aromatizaci je používáno několik rozdílných technologií, jako je macerace, přidavek přírodního extraktu, destilace nebo redestilace v přítomnosti rostlinného materiálu. Francouzský pastis může také obsahovat výtažky z kořene lékořice (*Glycyrrhiza glabra*), tudíž i chalkony, známá barviva [7].

1.2.5 Ovocné destiláty

Ovocné destiláty jsou považovány za nápoje s vysokým obsahem alkoholu. Ve většině případů se jedná čiré lihoviny s charakteristickou ovocnou vůní [28, 29]. Podle definice, jež je uvedena v Nařízení evropského parlamentu a rady (ES) č. 110/2008, jsou ovocné destiláty výhradně vyráběny alkoholovou fermentací dužnatého ovoce nebo ovocných šťáv. Destiluje se na méně než 86 obj. % alkoholu tak, aby byla zachována chuť a aroma původní suroviny. Minimální obsah ethanolu v ovocných lihovinách je 37,5 obj. %. Nařízení stanovuje i maximální povolený obsah methanolu, který je ve většině případů 1000 g/hl 100% alkoholu. Výsledné produkty by také neměly být uměle dochucovány [30, 31].

Ovocné pálenky jsou považovány za velmi populární alkoholické nápoje po celém světě. Zejména země střední a východní Evropy mají dlouholetou tradici ve výrobě ovocných destilátů [29, 31]. Nejčastěji používaným ovocem k výrobě pálenek jsou švestky, hrušky, meruňky, jablka nebo třešně. Zřídka se vyrábí i destiláty z ovoce s nízkým obsahem cukru, jakým jsou kdoule nebo jahody. Kuriozitou v ovocných destilátech jsou pálenky z citrusů a pomerančů (Itálie), nebo z melounů (Itálie, Španělsko) [31]. Chemické a organoleptické vlastnosti ovocných destilátů jsou ovlivněny nejprve výběrem suroviny (druh, odrůda a kvalita ovoce), podmínkami fermentace, typem destilace a také zráním a konečnou úpravou produktu [32]. Hlavními těkavými sloučeninami obsaženými v ovocných destilátech je ethanol, methanol a vyšší alkoholy. Methanol je produktem enzymatické hydrolýzy ovocného pektinu enzymem pektin-methylesterázou, která probíhá během procesu fermentace [28, 33].

1.2.5.1 Destiláty z peckovin

Typickými destiláty z peckovitého ovoce, jsou pálenky ze švestek, třešní, meruněk nebo slivoní mirabelky [7]. Chuť destilátu z peckovin je ve velké míře ovlivněna aromatickou sloučeninou benzaldehydu, který pochází z enzymatické degradace amygdalinu, jež je obsažen v peckách plodu. Chuť a vůně těchto destilátů je charakteristická ovocnými a květinovými tóny, hlavně v případě nízkého obsahu benzaldehydu a kyanovodíku. Ovocná

chuť je způsobena obsahem ethyl hexanoátu, γ -dekalaktonu, γ -dodekalaktonu, geraniolu a eugenolu [30, 34-36].

1.2.5.1.1 Švestkové destiláty

Švestkové destiláty, nazývané **slivovice**, jsou asi nejpopulárnějším druhem vůbec a díky tomu jsou hojně vyráběny v zemích střední a východní Evropy [31, 37]. Největšími výrobci slivovice jsou Česká republika, Polsko (Śliwowica), Slovensko (Slivovica), Maďarsko, Bulharsko, Srbsko a Rumunsko (Tuica). V menší míře produkují švestkový alkohol i země západní Evropy, jako Francie (Eau-de-vie), Německo (Zwetschgenwasser) nebo Švýcarsko (Pflaumliwasser) [31]. Postup výroby slivovice zahrnuje třídění švestek, drcení, fermentaci a nejčastěji frakční destilaci, aby došlo k odstranění nežádoucích frakcí. Obsah alkoholu v destilátu dosahuje 60 – 75 obj. %, podle potřeby se dále ředí vodou na 45 – 50 obj. %. Destilát pak může dozrávat po dobu 2 až 5 let v dubových sudech. Kromě cenných složek, obsahuje slivovice i nežádoucí složky, jako např. kyanovodík, methanol nebo ethyl karbamát [38]. Mezi tyto destiláty se řadí i švestková brandy, jež se vyznačuje výraznou chutí [39].

1.2.5.1.2 Třešňové destiláty

Další peckovinou, ze které se destiláty vyrábí, jsou třešně. **Třešňovice** jsou produkovány hlavně v jižním Německu, Francii, Švýcarsku a Srbsku. Sladké třešně se nechají několik týdnů kvasit, a poté se fermentovaná kaše destiluje. Výsledný destilát obsahuje 60 a více obj. % alkoholu a dále se ředí na 40 – 50 obj. % [30]. Jsou známé pro svoji typickou hořkou mandlovou chuť a vůni [31]. Tyto nakyslé plody obsahují mnoho těkavých látek, jako je benzaldehyd, linalool, hexanal, (2E)-hexenal, (2E),(6Z)-nonadienal, fenyl acetaldehyd a eugenol, které přispívají k jeho typické vůni a chuti [40].

1.2.5.1.3 Meruňkové destiláty

Dalším velmi populárním destilátem v Evropě jsou **meruňkovice**, jež jsou specifické obsahem aromatických těkavých látek, jako je linalool, okumenol, α -terpineol, nerol, geraniol, *cis*- a *trans*-linalool oxid. Dalšími charakteristickými látkami byly γ -dekalaton, γ -dodekalaton a ethyl cinnamát. Olfaktometrická analýza poukázala také na významný obsah β -damascenonu, ethyl-2-methyl butanoátu a methyl antranilátu, které jsou pravděpodobně obsaženy již v surovém plodu [30]. Na aroma meruňkových destilátů se dále podílí benzaldehyd, 2-fenylethanol a 4-terpineol [4]. Jiné studie deklarují navíc obsah β -iononu, který spolu s linaloolem dodává pálnice květinovou chuť. Ovocná chuť po broskvích

a kokosu je způsobená přítomností laktonů. Meruňkovice je typická také vysokým obsahem benzaldehydu, který jí dodává lehce mandlovou příchut' [41].

1.2.5.2 Destiláty z jádrového ovoce

Mezi typické zástupce jádrového ovoce používaného na výrobu ovocných destilátů patří jablka a hrušky. Destiláty z jablek a hrušek jsou charakteristické typickou vůní těchto plodů, která je tvořena enzymatickou degradací mastných kyselin na C6 fragmenty. Příkladem takových látek je hexanol, *trans*-2-hexenol, ethylestery a acetáty kyseliny hexanové [7, 34, 42].

1.2.5.2.1 Hruškové destiláty

Existuje mnoho hruškových odrůd, avšak z nejpoužívanějších pro výrobu destilátů jsou odrůdy Williams a Bartlett [30, 43]. V hruškových destilátech, zejména z odrůdy Bartlett, převládají ethyl- a methylestery *trans*-2-*cis*-4-dekadienové a *trans*-2-*trans*-4-dekadienové kyseliny [7, 34, 42]. Biogenezi těchto esterů lze vysvětlit β -oxidací nenasycené kyseliny linolové a kyseliny linolenové v ovoci. Další typickou sloučeninou seskviterpenického charakteru je α -farnesen, který se vytváří během zrání a skladování hrušek, což poukazuje na fakt, že intenzita vůně destilátů je ovlivněna kvalitou a stupněm zralosti ovoce [7].

1.2.5.2.2 Jablečné destiláty

Jablečné destiláty jsou připravovány destilací zkvašených jablek, jablečné šťávy nebo jablečného vína. Průměrný obsah cukru v surových jablkách se pohybuje mezi 8 až 12 % [30]. Nejznámějším jablečným destilátem je kalvados, který je vyráběn ve francouzské Normandii, z jablečného vína. Pro jeho výrobu jsou používány sladké, kyselé a hořké odrůdy jablek, tak aby získal svou typickou chuť [7, 30]. Fermentace jablek trvá přibližně 2 měsíce při nízkých teplotách (kolem 15 °C), aby se snížila ztráta těkavých esterů. Zkvašená jablečná šťáva stárne v dubových sudech po dobu 1 roku a poté je dvakrát destilována. Proces stárnutí dodává kalvadosu vanilkovou chuť. Kalvados je bohatý na estery, acetaldehyd, nenasycené alkoholy a aldehydy a deriváty fenolu, jež přispívají k jeho specifické chuti [7].

1.3 Výroba ovocných destilátů

Proces výroby ovocných destilátů lze shrnout do 4 základních kroků: příprava ovocné břečky, fermentace, destilace a skladování hotového ovocného alkoholu. Plody jsou mechanicky upravovány na ovocnou drť, která se dále dopravuje do fermentoru, kde se míchá a ochlazuje

na požadovanou teplotu. K rychlejšímu nastartování kvasného procesu jsou k ovocné drti přidávány kvasinky. Fermentace probíhá řádově několik dní až týdnů. Po skončení kvašení se kvas destiluje v destilační koloně s refluxem, z níž je jímán destilát. Destilát se shromažďuje v několika frakcích, jako úkap (první vyřazená frakce), střední frakce (produkt) a dokap (vyřazená poslední frakce) [44].

1.3.1 Suroviny

Pro výtěžek alkoholového kvašení je směrodatný obsah cukru v ovoci. Ovocné plody, použité k výrobě rmutu¹ musí být vyzrálé, zdravé a čisté. Nevhodné je zpracování shnilých a nedozrálých plodů. Nečistoty na ovoci mají vliv jak na průběh kvašení, tak i na produkty tím vznikající, což negativně ovlivňuje chuť pálenky. Stejně negativní vliv na fermentaci má nahnilé nebo plesnivě ovoce, které zpomaluje rychlost rozmnožování kvasinek [47, 48]. Některé plody, jako jsou jablka či hrušky, jsou po sklizni uskladněny k dozrávání. Během dozrávání těchto plodů se v nich obsažený škrob mění na jednoduché cukry, což ve výsledku zjemňuje aroma destilátu. Hrušky navíc obsahují třísloviny², jejichž obsah při skladování klesá. Oproti tomu peckovité ovoce se zpracovává ihned po sklizni [47].

1.3.2 Předúprava ovoce

Sklizené ovoce je nejprve vytríděno, aby nedocházelo ke zpracování infikovaného ovoce. Následuje praní nebo sprchování plodů, tedy očištění mechanických a mikrobiálních kontaminantů, jako je hlína nebo chemické postřiky [46]. Čisté ovoce se drtí za účelem rozrušení buněčné části plodu, což umožňuje získání ovocné šťávy a zpřístupnění cukerných složek pro kvasinky. Rozmělněné ovoce se nazývá rmut, nebo také ovocná břečka [45-48]. U měkkého ovoce vzniká břečka samovolně, avšak tvrdší plody je nutno rozemílat, drtit či pasírovat. To se provádí ručně, případně mechanicky pomocí elektrických drtičů [47, 48]. Třešně a další plody, u nichž tvoří stopky velký podíl, se zbavují stopek, neboť stopky obsahují látky drsné chuti, které se mohou přenášet do destilátu [47]. Pecky, případně jádřince se mohou také z plodů odstraňovat, a to pomocí odpeckovacích strojů nebo cezením rmutu. V případě ponechání pecek v ovoci je třeba dbát na to, aby nedošlo k naprasknutí pecek při mechanických operacích. Pecky i jádra totiž obsahují amygdalin, ze kterého se při kvašení uvolňuje kyanovodík. Obsah kyanovodíku v pálenice je normovaný (max. 10 mg/l absolutního lihu). V případě rozmělnění velkého množství pecek dominuje v destilátech hořkomandlová

¹ **Rmut** = někdy také nazývaný jako ovocná břečka, představuje rozmělněné ovocné plody, které ze sebe během procesu drcení a pasírování uvolňují ovocnou šťávu [45, 46].

² **Třísloviny** = látky obsahující C, H, O, jsou rozpustné ve vodě i v lihu, jsou slabě kyselé. Vyznačují se trpce svíravou chutí [49].

příchuť zastírající ovocné aroma [47, 48]. K drcení peckovin a bobulovin se používají válcové mlýnky, zatímco pro jádroviny jsou vhodnější kladívkové. Výhodou válcových mlýnků je nastavitelnost vzdálenosti válečků tak, aby nedošlo k rozmělnění pecek [46]. Švestky, třešně nebo mirabelky není nutno rozemílat, postačí pouze napěchovat do sudů, což je bezpečnější i z pohledu naprasknutí pecek [47]. V průmyslové výrobě ovocných destilátů se kromě mlýnků využívají i odpeckovací a pasírovací stroje, jimiž se z ovocné drti odstraňují pecky a jádřince [46]. U jadernatého ovoce se ve většině případů jádřince ponechávají. Z jádřinců se v břečce uvolňují mastné kyseliny, které mohou ve vyšších koncentracích zneprjemnit chuť výsledného destilátu. To je možno eliminovat tím, že se kvasí pouze ovocná šťáva. Kvašením ovocné šťávy vzniká ovocné víno, které se dále destiluje [47]. K získání ovocných šťáv k výrobě vína se využívají vinařské lisy [46]. Bobuloviny, jako jsou maliny, ostružiny, jahody, bezinky nebo rybíz, jsou tak měkké a bohaté na šťávu, že se nerozemílají, pouze se zbavují stopek [47].

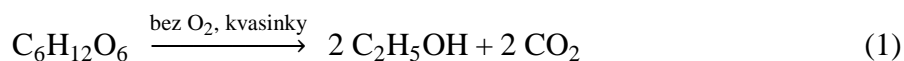
Rozmělněná ovocná břečka je dopravována čerpadly do uzavíratelných kvasných nádob [45, 46]. Kvasné nádoby mohou být vyrobeny z oceli, plastu, případně i skla s potravinářským atestem. Nezbytnou součástí kvasné nádoby je kvasný uzávěr, který slouží k odvádění vznikajícího oxidu uhličitého. Kvasný uzávěr je naplněn do určité výšky vodou, kterou probublává vznikající kvasný plyn, čímž je udržován malý přetlak v nádobě. Výhodou kvasného uzávěru je také to, že přes něj do nádoby neproniká vzduch, který by znehodnotil kvas divokými bakteriemi [45].

1.3.3 Zakvášení

Zakvášením se rozumí proces, kdy se do rozmělněné ovocné břečky před vlastním kvašením přidávají kvasinky, jimiž se proces fermentace nastartuje [48]. Spolu se správným druhem kvasinek se do rmutu přidávají ještě živné soli, které společně se stopovými prvky jsou nepostradatelnou součástí zdravého kvasu. Přesně definované poměry dávkování kvasinek a živných solí jsou uvedeny výrobcem na obalu. Výhodou použití čistých kultur je nepochybně vyšší výtěžnost ethanolu, ale i vedlejších aromatických produktů, které se podílí na chuti výsledného produktu. K tomuto je nezbytné také dodržovat i další technologické podmínky, jako jsou pH, teplota a anaerobní prostředí. U domácích kvasů je možné k zakvášení rovněž použít pekařské kvasnice. Nevýhodou je však jejich menší odolnost vůči alkoholu, proto je nutno počítat s menšími výtěžky [45].

1.3.4 Kvašení (fermentace)

Lihové kvašení je biochemický proces, při němž dochází k enzymatickému štěpení jednoduchých cukrů na ethanol a oxid uhličitý, jak uvádí rovnice (1). Kvasinky produkují alkohol v anaerobním prostředí, to jest bez přítomnosti vzdušného kyslíku.



V menší míře dochází ke vzniku vedlejších produktů, jako je glycerin, kyselina jantarová a octová, acetaldehyd a další vyšší alkoholy, jež jsou v destilátu označovány jako přiboudlina³ [46]. V ovocných destilátech rovněž vznikají složky, které jsou považovány za potenciálně negativně ovlivňující zdraví člověka. Do této kategorie patří methanol, kyanovodík a ethyl karbamát [31].

Existují 2 metody přípravy kvasu, a to tradiční samovolná nebo s přidavkem čistých kvasinkových kultur [45-47]. Ve stádiu kvašení, označujeme ovocnou břečku či rmut jako kvas [47]. Nejjednodušším způsobem je **příprava tradičního kvasu**. Tento způsob přípravy spočívá v pouhém naplnění kvasných nádob rmutem a samovolném nastartování procesu fermentace bakteriemi, jež přirozeně ulpívají na ovoci. Do tradičních kvasů se již žádný další cukr nepřidává a bakterie spotřebovávají pouze cukr přirozeně obsažený v ovoci. Přidavkem cukru k rozmělněnému ovoci je pak možno vyrobit vysokoprocentní kvas. Nevýhodou tradičního způsobu výroby je delší doba nastartování fermentace a také přítomnost nežádoucích bakterií, jež neprodukují alkohol, ale jiné látky. Nejvýznamnějšími zástupci takových mikroorganismů jsou octové bakterie, které vznikající ethanol svou činností přeměňují na ocet. Máselné bakterie pak produkují nepříjemně zapáchající kyselinu máselnou. Některé ve vzduchu přítomné plísně jsou schopny produkovat toxické zplodiny nebo odbourávat kyseliny v kvasu, čímž dochází k množení hnilobných kultur v nekyselém kvasu [45-47]. Druhým způsobem je **kvašení s přidavkem čisté kultury mikroorganismů**, které eliminuje nežádoucí vlivy, jako například ztráty cukru na úkor vedlejších produktů kvašení. Tento proces se v literatuře označuje jako zakvácení a je mu věnována předcházející kapitola [45, 47].

Proces kvašení ovocných rmutů se skládá z 3 charakteristických dějů: zahájení kvašení, hlavní bouřlivé kvašení a klidná fáze dokvašování. Při zahájení kvašení dochází hlavně k rozmnožování kvasinek, proto také vývoj CO₂ je velmi slabý. Druhou fází je hlavní kvašení,

³ **Přiboudlina** = směs vyšších alifatických alkoholů vznikající fermentací aminokyselin. Hlavními zástupci jsou propanol, izoamylalkohol, amylalkohol, butanol a některé další alkoholy s 5 uhlíky [46].

při níž dochází k silné a bouřlivé kvasné reakci, s níž je spojen silný vývoj CO₂ a rostoucí teplota kvasu. V této fázi dochází ke zkvašení hlavního podílu cukrů v ovocném rmutu. V poslední, klidné fázi, kterou nazýváme dokvašování, dochází k přeměně posledních zbytků cukrů na alkohol a pozvolnému ustávání vývoje CO₂ [47, 49]. Kvašení je ukončeno ve chvíli, kdy nedochází k vývoji CO₂, i v případě, že se s kvasem zamíchá. Dalšími ukazateli konce kvasného procesu je sedimentace pevných částic kvasu ke dnu nádoby a vznik čirého roztoku u povrchu kvasu, který je typický svou trpkou až mírně nasládlou chutí [45, 47]. Literatura uvádí, že pokud kvas leží několik týdnů po ukončení hlavního kvašení v kvasných nádobách, dochází k zintenzivnění vůně a chuti výsledného produktu, neboť v kvasu dochází k esterifikačním reakcím [45, 48].

Při prokvašení rmutu je nutné kontrolovat, zda kvasný plyn (CO₂) prochází kvasnou zátkou. To je ukazatelem činnosti kvasinek. Dalším kontrolovaným parametrem je optimální teplota a pH. V neposlední řadě se testuje kvas i senzoricky, zkoumá se tedy jeho chuť a vůně. U samovolných kvasů se posuzuje přítomnost plísní a nežádoucích produktů kvašení. Senzoricky se dá posoudit i kyselost kvasu. Každých 5 dní se doporučuje kvasem intenzivně promíchat [45].

Kvasy z letního ovoce se doporučuje vypálit co nejdříve po skončení kvašení, aby kvůli vyšším letním teplotám nedocházelo k octovatění. Kvasy z peckovin se rovněž doporučuje vypálit brzy, aby nedocházelo k vyššímu vývinu nežádoucích zplodin z amygdalinu, obsaženém v peckách [48]. I přes to, se dá omezenou dobu kvas skladovat, a to při dodržení skladovacích podmínek. Kvasy by měly být uchovávány v chladu (0 až 15 °C) ve vzduchotěsných nádobách. Vysokoprocenní kvasy, s více jak 16 obj. % alkoholu se tímto způsobem dají uchovávat i dlouhodobě [45, 48].

1.3.4.1 Kvasinky

Nejdůležitější skupinou jsou kvasinky rodu *Saccharomyces* z čeledi *Endomycetaceae*. Na počátku kvasného procesu dochází k množení kvasinek, k čemuž je zapotřebí kyslík a cukr, zatímco hlavní kvašení probíhá za anaerobních podmínek. Nejvhodnější pro lihové kvašení je *Saccharomyces cerevisiae*. V samovolně kvasících rmutech může být přítomna kvasinka *Saccharomyces pastorianus*, jejíž přemnožení může způsobovat výrazné snížení alkoholových výtěžků. Další kvasinkou vyskytující se v raných stádiích kvašení je *Saccharomyces apiculatus*, která se podílí se na tvorbě aromatických látek, avšak při narůstajícím obsahu ethanolu v kvasu mizí. Spontánní kvašení zahajují zejména kvasinky

rodu *Kloeckera*, *Hanseniaspora*, *Deckera* nebo *Brettanomyces*, které jsou velmi citlivé na alkohol a mizí z kvasů již po dosažení koncentrace 2 obj. % alkoholu. Tyto rody kvasinek produkují kyselinu octovou, ale i další estery, jež mohou ovlivnit aroma pálenky [46].

1.3.4.2 Vliv pH

Důležitým kontrolovaným parametrem během procesu kvašení je hodnota pH. Hodnota pH ovlivňuje růst kvasných kultur. V případě příliš vysoké či nízké hodnoty kyselosti kvasu dochází k úhynu mikroorganismů nebo ke zvýšenému růstu nežádoucích kmenů kvasinek. Optimální rozmezí hodnot pH je 3,5 – 6. Některé kvasinky dobře snáší i hodnoty pod 3,5, ale špatně pH převyšující hodnotu 7. Měření hodnoty kyselosti rmutu je prováděno pomocí pH papírků nebo pH metrů. V praxi se většinou setkáváme s málo kyselými kvasy. Úprava hodnoty pH se provádí pomocí přídavku citronové nebo pomerančové šťávy či kyseliny citronové [45].

1.3.4.3 Vliv teploty na kvašení

Teplota je dalším důležitým faktorem, jenž ovlivňuje fermentační proces. Ideální rozmezí teplot, ve kterém kvasinky obvykle pracují, je 17 – 27 °C. Při překročení tohoto teplotního rozmezí probíhá kvašení velmi rychle, což vede k velkému úniku CO₂, který na sebe strhává i vznikající aromatické látky. Druhým extrémem je kvašení při nižších teplotách, než dané rozmezí, kdy dochází ke zpomalení kvašení, což sice může mít pozitivní vliv na výsledný produkt, ale v letním období jsou tyto podmínky těžce dosažitelné. Při nekontrolovatelně vysokých teplotách pak dochází k odumírání kvasinkových kultur [45].

1.3.4.4 Pektolýza - enzym ztekucující kvas

Polysacharid pektin, který se přirozeně z ovoce uvolňuje, způsobuje svým nabotnáním zvýšení viskozity kvasu a jeho gelovatění. To zapříčiňuje problematickou manipulaci s takovým kvasem a také nižší alkoholové výtěžky. Kvasinky přirozeně bojují proti gelovatění kvasu tím, že produkují enzym pektinázu, který zabraňuje tvorbě pektinu. Produkce kvasinek však není dostatečná, proto se může ztekucující enzym pektináza přidávat do kvasu uměle. Přídavkem tohoto enzymu dochází také k lepšímu uvolnění ovocného aroma. Štěpením pektinů však může vznikat i vyšší množství methanolu, kterému je třeba při destilaci věnovat zvýšenou pozornost [45, 46].

1.3.4.5 Měření obsahu alkoholu v kvasu

Pro měření koncentrace alkoholu v kvasech se používá vinometr, což je zařízení v podobě tenké skleněné kapiláry se zásobníkem. Před měřením se kvas musí přefiltrovat přes kávový filtr, aby tuhé částice kvasu neucpávaly kapiláru. Nádobka na horní straně vinometru se naplní filtrátem tak, aby jím byla naplněna celá kapilára. Poté se vinometr ve vertikální poloze otočí o 180°. Filtrát pomalu vytéká z kapiláry a ve chvíli, kdy se ustálí hladina v kapiláře, může dojít k odečtení výšky sloupce tekutiny, resp. příslušné odpovídající koncentraci alkoholu v obj. % [45].

1.3.4.6 Měření obsahu cukru v kvasu

Pro měření obsahu cukru v kvasu je nutno kvas zfiltrovat. Obsahu cukru se pak měří v ovocné šťávě pomocí speciálních hustoměrů (cukroměry, moštoměry) a refraktometrů. Všechna tato měřidla ovlivňuje obsah alkoholu v kvasu a to tak, že čím vyšší je podíl alkoholu v kvasu, tím cukroměr ukazuje nižší a refraktometr vyšší. Cukroměry udávají hmotnostní obsah cukru vyjádřenou v g cukru/100 g moštu při 20 °C, zatímco moštoměry udávají hodnotu vyjádřenou v kg cukru/100 l moštu. K rychlému stanovení obsahu cukru se využívají refraktometry, které pracují na principu lomu světla na rozhraní dvou různých prostředí. Úhel lomu, jehož hodnota se odvíjí od hustoty měřeného roztoku, je pak odečítán na stupnici v okuláru refraktometru [46, 48].

1.3.5 Destilace

V případě získání kvalitního kvasu nastává nejdůležitější a nejobtížnější krok celého procesu, kterým je destilace. Destilace je separační proces, používaný k rozdělení směsí těkavých látek na základě rozdílných bodů varů. Zahříváním kapalné směsi těkavých látek se tvoří parní fáze, která je obohacena o těkavější složku dané směsi, tj. složku s nižším bodem varu než kapalina (ethanol $t_v = 78,3$ °C, methanol $t_v = 64,7$ °C a další látky), z níž je odpařován. Naopak je tomu, pokud je pára ochlazována. V tomto případě, méně těkavá složka s vyšším bodem varu (voda $t_v = 100$ °C) kondenzuje dříve, než těkavější složka [16, 45, 50]. Směs ethanol-voda není možné destilací zcela rozdělit, lze dosáhnout pouze 97,2 obj. % alkoholu. Tato maximální hodnota je nazývána azeotropickým bodem, což je charakteristický stav, kdy koncentrace ethanolu v parách je stejná jako v kapalině. K získání absolutního ethanolu je třeba destilaci kombinovat s jinými chemicko-inženýrskými procesy, jako např. extrakce [45].

Ovocné destiláty obsahují tisíce těkavých i netěkavých složek, někdy nazývaných jako kongenery. Tyto látky se vyskytují v různých koncentracích v závislosti na typu destilátu

a použité destilační metodě. Některé z nich přechází vlivem destilace do destilátu, jiné však zůstávají ve fermentační směsi, resp. v destilačním zbytku. Naprosto běžnými kongenery vyskytujícími se v destilátu jsou acetaldehyd, ethyl acetát, ethyl formiát, methanol a nižší alifatické alkoholy (*n*-propanol, *n*-butanol, isobutanol) [51]. Vedlejšími produkty destilace mohou být vyšší alkoholy, estery, mastné kyseliny, acetaly, aldehydy nebo ketony [52, 53]. Každý z těchto kongenerů pak ovlivňuje chuť a aroma výsledného destilátu [54].

1.3.5.1 Průběh destilace

Zralý kvas je nejprve přečerpán do destilačního kotle (vařáku). Kotel je kvasem naplněn asi do 2/3 až 3/4 svého objemu. Volný prostor je důležitý hlavně u pálení silně pěnících kvasů, přičemž by mohlo docházet k ucpaní přestupníku a chladiče. K zabránění pění kvasů je možno přidávat speciální odpěňovací prostředky nebo potravinářské oleje. Surovina v kotli je mírným ohříváním přivedena k varu. Po celou dobu destilace je vhodné surovinou míchat, aby nedocházelo k připalování hustých kvasů na stěně kotle. Správně nastavenými podmínkami destilace lze pak ovlivnit přechod jednotlivých látek do destilátu [45-47]. Zahříváním kvasu dochází k převodu látek do parní fáze. Unikající páry prochází patry destilační kolony, zpravidla kloboučkovými, na kterých dochází k obohacování par o těkavější složky, resp. ochuzování o méně těkavé. Při průchodu parní fáze kapalnou vrstvou na patře dochází k zakoncentrování méně těkavých látek v kapalině, a odpaření těkavějších složek do přestupníku a chladiče. Méně těkavé látky, jako je voda, vyšší alkoholy nebo kyselina octová kondenzují a přepadem stékají níže. Tyto látky se teprve zvýšením teploty destilace dostávají až do destilátu. Čím je ohřev pomalejší, tím je vzniklý destilát bohatší o aromatické látky a alkohol, zatímco nežádoucích výše vroucích složek do něj přechází méně [48]. Rozhodující je rychlost destilace. Optimální je vést destilaci co nejpomaleji, neboť dochází k lepšímu rozdělení složek směsi suroviny. Doba destilace závisí na obsahu alkoholu v kvasu a na velikosti destilačního zařízení, řádově se pohybuje mezi 3 až 4 hodinami. Po celou dobu destilace se sleduje orientační stupňovitost destilátu⁴ na lihoměru. Po ukončení destilace se zastaví přívod tepla a výpalky⁵ se z kotle vypustí. Kotel se pak řádně propláchnou vodou, aby v něm nezůstávaly zbytky kvasu pro další pálení [45-47].

Kvasy se zpracovávají jednostupňovou destilací, nebo dvojestupňovou destilací (přepalováním), či rektifikací [47]. V případě dvojestupňové destilace je střední frakce z první hrubé destilace surovinou pro druhou jemnou destilaci. Tímto procesem dochází ke zvýšení

⁴ **Stupňovitost destilátu** = obsah ethanolu v objemových %, měří se lihoměry během i po destilaci [55].

⁵ **Výpalky** = označení pro zbytek ovocného kvasu ve formě husté kaše, který po destilaci zůstává ve vařáku [47].

obsahu alkoholu a k maximálnímu oddělení nežádoucích složek obsažených v produktu první destilace. Přepalovacím procesem se opět látky rozdělují do 3 frakcí [48]. Je nutno dodat, že každou další destilací se ztrácí aromatické látky, neboť dochází k lepšímu rozdělení směsi těkavých látek. Zároveň je tím získán celkově menší výtěžek alkoholu. Z tohoto důvodu, je lepší provádět jednu optimalizovanou destilační proceduru [45].

1.3.5.2 Destilační frakce (úkap, prokap, dokap)

Po dokončení kvašení je kvas rozdělen destilací do 3 frakcí: úkap (hlava, přední frakce), jádro (prokap, střední frakce) a dokap (konečné frakce) [45, 54]. Postupným zvyšováním teploty je možno tyto frakce oddělit. Jakmile se objeví první destilát, začne teplota na hlavě kolony stoupat, což je ukazatelem úbytku nejtěkavějších složek. Dojde-li k ustálení teploty, z dlouhodobého pohledu k mírnému stoupání, nastává sběr středních frakcí. Jakmile teplota dosáhne přibližně 91 °C, začíná zpravidla vytékat dokap. V případě, že chceme dokap znovu destilovat, odebírá se maximálně do teploty 95 °C [45].

Úkap je první frakce vytékající z kolony, neboť má nejnižší teplotu par. V tomto prvním destilačním produktu jsou obsaženy těkavé látky s nejnižším bodem varu. Ve větší míře vzniká úkap při pálení kvasu z nahnílého, nečistého či plesnivého ovoce. V takovém úkapu jsou obsaženy sensoricky negativně působící či zdraví škodlivé složky. Nejčastěji se jedná o acetaldehyd ($t_v = 20$ °C, ostrý kovově jablečný zápach, nečisté kvašení), akrolein ($t_v = 44$ °C, ostře pálivá chuť, ovoce znečištěné hlinou), kyanovodík ($t_v = 26$ °C, jedovatý, z amygdalinu v jádrech), methanol ($t_v = 65$ °C, zdraví škodlivý, z ovocných pektinů, ve větší části v úkapu, ale rozptyluje se do všech frakcí), octan ethylnatý ($t_v = 77$ °C, octová chuť, produkují bakterie a vznikají reakcí ethanolu s kyselinou octovou) a ethyl formiát ($t_v = 54$ °C). Přítomny jsou i látky vznikající činností bakterií ulpívajícím na nezdravém ovoci, jako jsou kyselina octová, máselná nebo propanová. Z důvodu vysoké koncentrace alkoholu v úkapu (60 – 80 obj. %), lze charakterizovat úkap ostrou chutí a pálivým zápachem [16, 44, 45, 48].

Prokap, někdy nazývaný jako **srdce** nebo **jádro destilátu**, obsahuje zejména ethanol s ovocným aroma. Jádro tvoří největší frakci z celého procesu. Jeho chuť a vůně je typická pro dané ovoce, z něž byl kvas připraven. Čerstvě vydestilované jádro destilátu má říznou ostrou chuť, neboť jeho koncentrace dosahuje 50 a více obj. %. Podle chuti se pak ředí kvalitní vodou na požadovanou lihovitost. Odběr středních frakcí se řídí nejen sledováním koncentrace ethanolu na lihoměru, ale také sensorickými zkouškami. Jakmile se v prokapu objeví první vůně a chuť přiboudliny, jímání této frakce se ukončí. Tento okamžik

se projevuje také mírným zákalem odebíraného destilátu. U peckovitého ovoce dochází k zakalení náhle, avšak u jadernatého ovoce zvolna [16, 45, 47, 48].

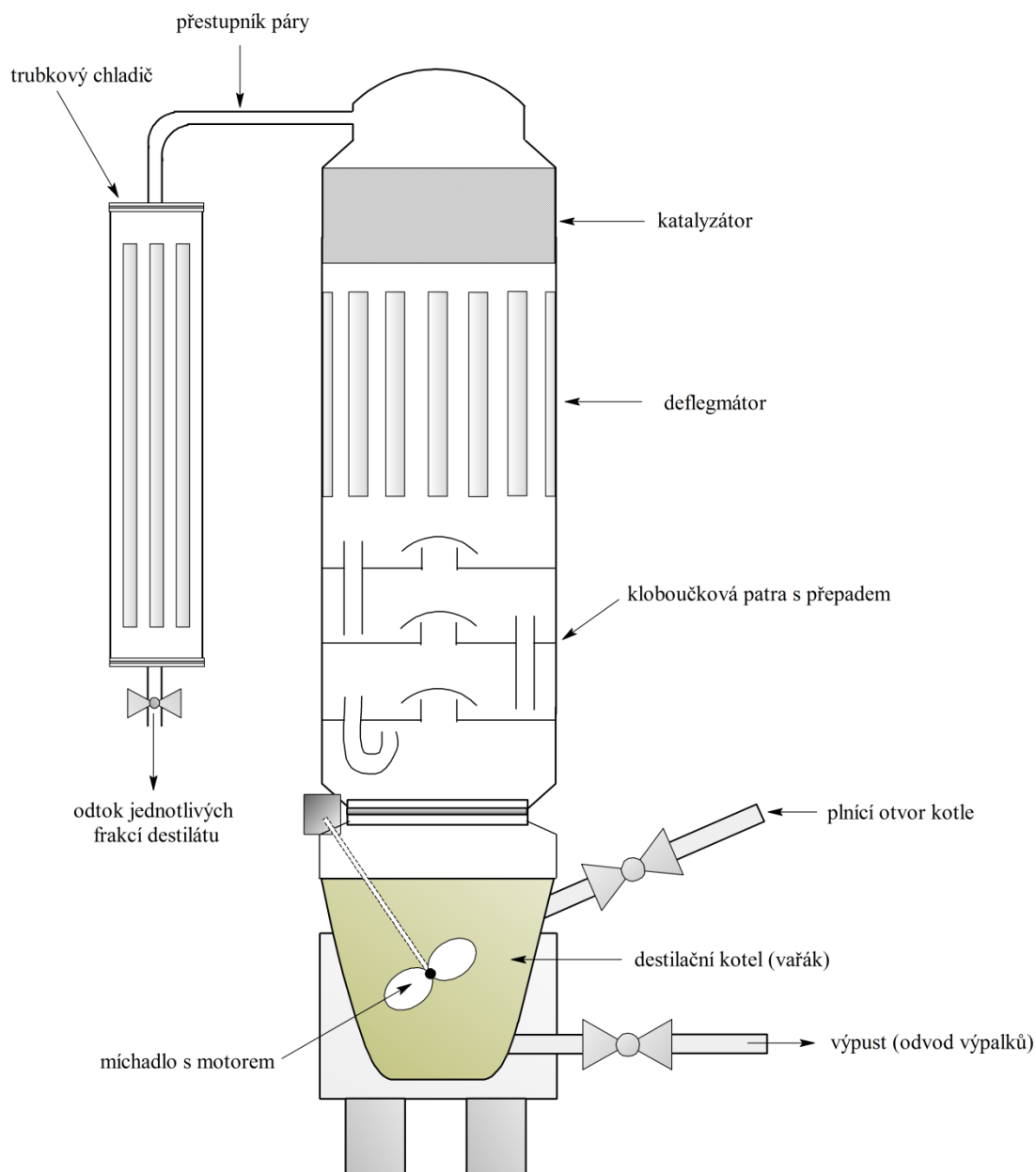
V závěrečné frakci, tedy **dokapu**, postupně klesá obsah alkoholu přibližně na 20 až 40 obj. % a s rostoucí teplotou těkají látky s vyšším bodem varu (přiboudlina). Látky přecházející do dokapu pochází ze suroviny, jsou to produkty kvašení, nebo vznikly rozkladem kvasu za vyšší teploty. Typickou vlastností této frakce je nepříjemný zápach a mdlá chuť ve srovnání s jádrem. Tuto vlastnost způsobují vyšší fuselové alkoholy, sacharidy nebo proteiny. Do skupiny málo těkavých fuselových alkoholů patří propanol ($t_v = 92,7 \text{ }^\circ\text{C}$), butanol ($t_v = 118 \text{ }^\circ\text{C}$) a amylakohol ($t_v = 131,6 \text{ }^\circ\text{C}$). Fuselové alkoholy, někdy zvané fuseloly, jsou charakteristické silným nepříjemným zápachem i chutí. Fuseloly dodávají destilátu viskóznější charakter, který je v malé míře vítán, například u brandy. Dokap dále obsahuje kyselinu octovou ($t_v = 118,1 \text{ }^\circ\text{C}$), jež je přirozeným fermentačním produktem oxidace ethanolu, a je charakteristická kyselou chutí a štiplavým zápachem. Další bezbarvou olejovitou složkou konečné frakce je furfural ($t_v = 161,7 \text{ }^\circ\text{C}$), který voní po mandlích [16, 45, 47, 48, 51, 53].

1.3.5.3 Destilační zařízení

V malých pálenicích jsou používány jednoduché tradiční destilační aparatury. Součástí tradiční destilační aparatury je kotel s míchadlem, chladič, jímka na destilát, měřidlo lihu, nádrže na úkapy, dokapy a výpalky. Někdy jsou kotle doplněny deflegmátorem. Moderní destilační přístroje jsou zpravidla vybaveny katalyzátorem, rektifikačními patry, deflegmátorem a chladičem. Tradiční i moderní destilace jsou plněny vsádkovým způsobem a jsou konstruovány z čisté mědi nebo nerezové oceli v kombinaci s mědí. Existují buď přímé, nebo nepřímé způsoby vyhřívání **destilačního kotle**. Přímé vyhřívání kotle dřevem, uhlím nebo plynem vyžaduje sledování teplot během celého procesu a regulace teplot je náročná na obsluhu. K nepřímému vytápění se nejčastěji používá pára nebo vodní lázeň, které umožňují citlivější regulaci teplot, což snižuje riziko přehřátí kvasu [46, 47, 49]. Pára z kotle stoupá do patrové **rektifikační kolony**. Rektifikační kolony jsou zpravidla tvořeny 3 nebo 4 kloboučkovými patry. Na každém patře dochází k intenzivní látkové výměně mezi kapalnou a parní fází. Jednotlivá patra pak mohou být podle potřeby vyřazena z procesu, otevřením kloboučku. Po průchodu kolonou parní směs prochází **deflegmátorem**. Deflegmací se rozumí částečná kondenzace par. V deflegmátoru dochází ke snížení teploty, čímž kondenzují látky s vyšším bodem varu (méně těkavé, vodní pára), které stékají zpět na nejvyšší patro

rektifikační kolony a tvoří reflux⁶. Z toho vyplývá, že směs vystupující z deflegmátoru je obohacena o ethanol. K ještě většímu zesílení popsaného efektu dochází v případě zařazení dalšího deflegmátoru nad vařák. Konstrukce deflegmátorů může být trubková, talířová nebo šterbinová. Jejich konstrukce i teplota deflegmace má vliv na účinnost destilace. Ke snížení účinnosti destilace dochází, pokud je deflegmátor na počátku destilace příliš teplý. V opačném případě, pokud je teplota na počátku příliš nízká, dochází ke zpomalení destilace. Stále častěji bývá nad deflegmátorem zařazen **katalyzátor**, za účelem snížení obsahu ethyl karbamátu v destilátu. Ethyl karbamát reaguje s povrchem měděné aparatury za vzniku málo těkavých produktů. V praxi pak katalyzátory představují měděné spirály nebo lamely. Spirály s povlaky usazenin se pak čistí nejčastěji horkou vodou s hydroxidem sodným a poté roztokem kyseliny citronové. K ochlazení par na požadovanou teplotu a následné kondenzaci se využívá jednoduchých **chladičů**. Nejčastěji jsou to chladiče trubkové konstrukce, kde kolem svazku měděných trubek, v nichž prochází lihové páry, proudí chladicí voda. Posledním zařízením, přes které zkondenzovaný destilát prochází je **lihové měřidlo**. Tím musí být vybavena každá pěstitelská pálenice a lihovar. Zaznamenává se údaj o lihovitosti proteklého destilátu [45, 46]. Schéma rektifikační kolony je zobrazeno na obrázku 2.

⁶ **Reflux** = zpětný tok, kdy část par (směs těkavých i netěkavých látek) zkondenzuje a vrací se zpět na hlavu rektifikační kolony. Tento tok je nezbytný pro funkčnost posledního patra kolony [46, 48].



Obrázek 2: Destilační zařízení pro jednostupňovou destilaci kvasu (převzato z [56]).

1.3.5.4 Finalizace produktu

Destilací kvasu se mohou do destilátu dostávat i nežádoucí látky, jako jsou těžké fuselové oleje a jiné dokapové složky, nebo jiné nežádoucí nečistoty z ředící vody, které mohou tvořit zákal. Zákal mohou rovněž způsobit esenciální oleje, jež jsou ve větší míře obsaženy v pálenkách z ořechů, anýzu nebo citrusů. Tyto látky se z finálního destilátu odstraňují jednoduchou filtrací přes dva skládané filtry nebo filtrací přes aktivní uhlí v sloupcovém uspořádání. K lepšímu vysrážení látek je dobré destilát dostatečně ochladit, neboť se v něm látky poté hůře rozpouštějí. Stejně tak se dá filtrace přes aktivní uhlí použít pro přečištění

dokapu, čímž odstraníme přiboudlou chuť dokapu nebo získáme chuťově neutrální alkohol, který lze dále využívat [16, 45, 46].

Pokud získáme destilát bohatý na alkohol je nutno ho ředit. K ředění na požadovanou lihovitost je nejvhodnější destilovaná voda. Při použití vodovodní vody může dojít k vytvoření zákalu, který je způsoben ve vodě rozpustnými, ale v alkoholu nerozpustnými vápenatými solemi [16, 45]. Obvykle se destiláty ředí na 50 obj. % alkoholu, avšak v některých oblastech i na větší koncentrace. K měření lihovitosti destilátu se používají lihoměry, které udávají obsah alkoholu v hmotnostních nebo objemových procentech, např. v ml ethanolu/100 ml roztoku [46].

1.3.5.5 Skladování destilátu

Vysokoprocentní destiláty se skladují ve skleněných, kameninových nebo nerezových nádobách, avšak nikdy ne v plastových. Při kontaktu alkoholu s plastovými nádobami dochází k vylučování změkčovadel do roztoku. Nádoby musí být opatřeny nejprve vatovými a poté silikonovými uzávěry. Vatové zátky jsou používány první 2 až 3 týdny po vypálení destilátu, což umožní kontakt se vzduchem, který zaokrouhluje jeho ostrou chuť. Tento proces nazýváme větrání destilátu. Nádoby s destiláty se skladují ve tmě a chladu. Všechny ušlechtilé destiláty podléhají stárnutí, jinak řečeno fyzikálně-chemickým změnám, které mají vliv na chuť, vůni, konzistenci a barvu. Zrání destilátu působí na jakost pálenky zpravidla příznivě, ale mohou se objevit i nežádoucí přeměny látek, jako např. esterifikační reakce těkavých mastných kyselin a ethanolu nebo vyšších alkoholů. Ke zhoršení kvality destilátu, způsobené dlouhým zráním, dochází v případě malinové pálenky, jejíž aroma v pozdější fázi připomíná spíše čerstvou mrkev. Stejným reakcím podléhají i destiláty z jahod, borůvek nebo ostružin, které nejlepšími sensorickými vlastnostmi dosahují 3 měsíce po vypálení a poté jejich kvalita pomalu klesá [45, 46, 49].

1.4 Chemické složení ovocných destilátů

Alkoholické nápoje jsou velmi složité směsi látek, jež kromě ethanolu zahrnují řadu těkavých organických sloučenin (Volatile Organic Compounds, VOC). Tyto sloučeniny jsou jedinečné pro každý druh těchto nápojů a definují jeho typické aroma, vzhled a chuťové vlastnosti [57-60]. Většina těkavých látek při destilaci přechází jako vedlejší produkty do směsi alkoholu a vody. Z nichž můžeme uvést methanol, vyšší alkoholy, estery, mastné kyseliny a karbonylové sloučeniny, jako jsou aldehydy, ketony a acetyly [51, 53]. Při destilaci přechází těkavé látky z kvasu do destilátu, a v průběhu destilace se jejich složení a podíl mění [46].

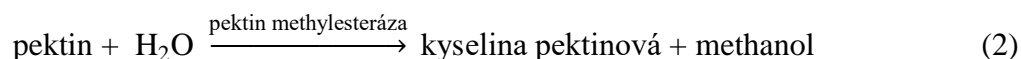
Koncentraci a složení těkavých látek ovlivňují suroviny, zejména jejich kvalita a zeměpisný původ (půda, klima, nadmořská výška, příjem vody). Mezi další faktory ovlivňující složení destilátu patří fermentační podmínky (teplota, pH, aerační podmínky, kmeny kvasinek atd.) a destilační parametry. Stejný význam pro koncentraci či vznik určitých sloučenin má doba a nádoby či místo stárnutí destilátu [31, 38, 57, 60-63].

1.4.1 Alkoholy

Klíčovou složkou všech destilátů je **ethanol**, vznikající při lihovém kvašení cukerných roztoků. Tato hořlavá těkavá kapalina palčivé chuti má bod varu 78 °C. Obsah ethylalkoholu závisí zejména na zralosti ovoce a stupni prokvašení [48].

Současně s ethanolem vznikají v kvasu i **vyšší alkoholy**, které přirozeně přechází do destilátu, kde se označují jako **přiboudlina** a mají značný vliv na aroma destilátu. Množství a druh vyššího alkoholu v destilátu nelze nijak ovlivnit. Mezi vyšší alkoholy vyznačující se příjemnou vůní patří propanol a isopropanol. Jejich body varu jsou v rozmezí 82 – 97 °C, a proto přechází plynule do destilátu. Vyšší alkoholy s body varu v rozmezí hodnot 108 – 117 °C jsou typické nepříjemným zápachem, který je nežádoucí a je nutno ho odstranit. S rostoucí destilační teplotou roste i obsah nežádoucích vyšších alkoholů. Z tohoto důvodu je nutno včas ukončit jímání jádra pálenky [48]. Typickými zástupci vyšších alkoholů s nepříjemným zápachem jsou fuselové alkoholy, jejich bod varu je vyšší v porovnání se ethanolem. Množství fuselových alkoholů se pohybuje, relativně k ethanolu, v rozmezí 0,1 až 0,7 obj. %. Isoamylalkoholy, jako 2-methyl-1-butanol nebo 3-methyl-1-butanol, tvoří největší podíl vyšších alkoholů v destilátu, zatímco isobutanol a *n*-propanol jsou přítomny v menším množství [53, 64].

Dalším diskutovaným alkoholem je **methanol**, který těká během celé destilace kvasu, stejně jako ethanol. Důvodem jsou velmi blízké body varu methanolu a ethanolu, což znemožňuje úplné odstranění methanolu jednoduchou destilací [46]. Methanol vzniká enzymatickou hydrolýzou ovocného pektinu, a to podle rovnice (2), z níž je patrné, že jeho koncentrace je ovlivněna aktivitou pektin methylesterázy, která je přítomna v různém množství v ovoci.



Obvykle je koncentrace methanolu v pálenkách nízká, vyjma případů, kdy fermentace ovoce probíhá s peckami a slupkami [31, 53]. Methanol je toxická sloučenina, která může mít smrtelný účinek v množství větším než 40 až 50 g [53].

1.4.2 Karbonylové sloučeniny

Karbonylové sloučeniny, jako jsou aldehydy a ketony, vznikají během fermentačního procesu a jsou taktéž obsaženy ve zralém ovoci, zejména pak v přezrálém ovoci. Jejich koncentrace je závislá na obsahu cukru v ovoci, resp. na druhu ovoce, kmenu kvasinek a pH prostředí [46, 48, 53, 64]. Tyto složky těkají společně s ethanolem. Obsah aldehydů v destilátu klesá do 20 až 30 obj. % alkoholu, a poté mírně stoupá, podle druhu ovoce. Ke konci destilace pak dochází opět k poklesu koncentrace aldehydů [46]. Aldehydy mohou také vznikat oxidací alkoholů. Taktéž může docházet k reakci vzniklých aldehydů s alkoholy na acetaly, které se vyznačují příjemnou ovocnou chutí. K této reakci může docházet i při stárnutí pálenky [46, 48].

Nejvýznamnějšími zástupci této skupiny jsou **acetaldehyd** a **benzaldehyd**. Acetaldehyd s nízkým bodem varu ($t_v = 21\text{ °C}$) je nežádoucí složkou destilátu a jeho hlavní podíl se odstraňuje v úkapu. Aromatický benzaldehyd ($t_v = 179\text{ °C}$) vzniká z pecek, v menší míře i z jádřinců jablek a hrušek. Benzaldehyd těká jak do středních frakcí, tak do dokapu. Je typický hořkomandlovou chutí, která se přenáší až do pálenky. Nadbytek benzaldehydu je sensoricky hodnocen jako nežádoucí, neboť zastírá ovocné tóny [46, 48]. V přítomnosti většího množství vzdušného kyslíku, zejména při míchání nebo stáčení, dochází k oxidaci benzaldehydu na kyselinu benzoovou, která může dále esterifikovat na velmi aromatické produkty. Kvasinky za redukčních podmínek mohou benzaldehyd v kvasu redukovat na benzylalkohol a fenylacetyl karbinol [46].

Pálenky mohou taktéž obsahovat butyraldehyd, isobutyraldehyd, propionaldehyd, krotonaldehyd, pentanal, isopentanal, hexanal, 2-butanon, furfural, diacetyl, acetylaceton, akrolein, aceton a glyoxal. Většina z výše uvedených způsobuje nepříjemnou chuť a zápach, i přesto, že jsou obsaženy v nízkých koncentracích. Akrolein je navíc silně karcinogenní a dráždí oči a dýchací systém [53, 64].

1.4.3 Kyseliny a jejich funkční deriváty

Nejvíce **kyselin** se vyskytuje ve frakci obsahující 50 obj. % alkoholu a také ve frakci s nízkým obsahem ethanolu (5 – 10 obj. %), kdy jejich koncentrace prudce vzrůstá až do konce destilace [46]. Kyseliny, v důsledku kvašení, podléhají mnoha biochemickým procesům, zejména esterifikačním reakcím. Reakcí ethanolu s různými kyselinami vzniká celá řada esterů, které mohou působit příznivě i nepříznivě na aroma pálenky [48]. Obsah esterů klesá do 30 obj. % alkoholu v destilátu a poté mírně roste [46].

Estery vznikají kondenzací alkoholů a kyselin, zejména v průběhu fermentace a stárnutí destilátů. Koncentrace esterů se odvíjí od použitého kmenu kvasinek, mikrobiologické čistoty a pH prostředí. Vyznačují se velmi intenzivním zápachem již při nízkých koncentracích [53].

Kyselina octová ($t_v = 118\text{ °C}$) vzniká aerobní oxidací ethanolu, působením octových bakterií. Díky vyššímu bodu varu přechází do destilátu až ke konci destilace a je nežádoucí, hlavně díky své štiplavé a drsné chuti. Octovatění probíhá pouze na povrchu kvasu, nikoli v objemu, neboť nedochází ke styku se vzduchem. Octovatění kvasu je urychleno kvašením při teplotách nad 15 °C , promícháním horní zoctovatělé vrstvy do celého objemu a nízkým obsahem alkoholu v kvasu. Octovatění probíhá výhradně za těchto podmínek, jinak se zastaví [48].

Silnější octovou chuť než kyselina octová zapříčiňuje **ethyl acetát** (octan ethylnatý). Jeho přítomnost je znakem zvýšené koncentrace kyseliny octové v kvasu, která může pocházet z činnosti divokých kvasinek a octových bakterií na ovoci [48, 53]. Nejvíce ethyl acetátu se objevuje v úkapové frakci [46].

Kyanovodík je tvořený enzymatickým účinkem a tepelným štěpením kyanogenních glykosidů. Jedním z kyanogenních glykosidů je amygdalin, který je obsažen v peckovinách a je nejčastějším prekurzorem ethyl karbamátu. Kyanovodík vzniká z amygdalinu. Je silně jedovatý a těkavý ($t_v = 26\text{ °C}$). Jeho velká část se proto odvádí v úkapu a prvních frakcích jádra, avšak benzaldehyd v destilátu zůstává. Jeho vznik a vliv se eliminuje odpeckováním ovoce. Při skladování hotové pálenky na světle dochází k reakci kyanovodíku s ethanolem za vzniku ethyl karbamátu [48, 65, 66].

Ethyl karbamát (uretan, ethylester kyseliny karbamové) je známý svým karcinogenním a genotoxickým účinkem a vyskytuje se ve fermentovaných potravinách a nápojích. Prvním krokem vzniku ethyl karbamátu je oxidace kyanovodíku na kyanát. Ten pak reakcí s ethanolem poskytuje ethyl karbamát. Nejvyšší koncentrace ethyl karbamátu jsou přítomny v lihovinách z peckovin, jako jsou pálenky z třešní, švestek, slivoně mirabelky nebo meruňky. Prevencí vzniku ethyl karbamátu v alkoholických nápojích je přidavek solí mědi k vysrážení kyanidu v moštu, nebo destilace za použití měďnatých katalyzátorů [48, 66]. Za určitých podmínek, jako je působení světla a tepla, se může ethyl karbamát formovat z močoviny, kyanovodíku nebo citrulinu, které jsou běžně přítomny v potravinách a nápojích [31].

Mastné kyseliny se v destilátech vyskytují pouze v nepatrném množství a dodávají destilátu mýdlovou chuť. Nejčastěji jsou to, kyselina kapronová, kaprylová, myristová a laurová. Dále

může být přítomna i kyselina palmitová, stearová nebo olejová, které jsou hromaděny v kvasinkách a poté přechází do kvasu během fermentace [53].

1.5 Extrakce těkavých látek z ovocných destilátů

Před vlastní analýzou těkavých látek v ovocném destilátu je nutno sloučeniny z matrice izolovat. Jedním z nejefektivnějších nástrojů izolace látek jsou extrakční techniky. Principiálně nejjednodušší je extrakce v systému kapalina-kapalina, která však není dostatečně účinná pro izolaci velmi nízkých až stopových koncentrací těkavých látek z destilátu. V tomto případě, se přistupuje k vícenásobné extrakci kapalina-kapalina, čímž dochází ke zvýšení obohacovacího faktoru⁷. Velkou nevýhodou je časová náročnost této techniky a použití velkého množství, mnohdy toxických či nákladných rozpouštědel [68]. Diskutované nedostatky této techniky jsou eliminovány především použitím pokročilých extrakčních technik, které nevyžadují použití rozpouštědel. Jejich provoz je levný, rychlý a nenáročný na obsluhu. K pokročilým technikám řadíme: extrakci tuhou fází, mikroextrakci tuhou fází nebo její modifikace, kdy dochází k mikroextrakci látek tuhou fází z parního prostoru nad vzorkem, tzv. z headspace prostoru. Z dalších technik využívaných pro izolaci látek z alkoholických nápojů můžeme zmínit extrakci nadkritickou tekutinou a sorpční extrakci na míchadle [69, 70].

1.5.1 Extrakce kapalina-kapalina

Principem extrakce kapalina-kapalina (Liquid-Liquid Extraction, LLE), je difúze složek mezi dvěma nemísitelnými kapalnými fázemi, na základě rozdílné rozpustnosti matrice a látek, v ní obsažených. Látky jsou transportovány přes fázové rozhraní, obvykle mezi vodným roztokem a organickým rozpouštědlem. Polární hydrofilní sloučeniny preferují transport do vodné, resp. polární fáze, zatímco nepochární hydrofobní sloučeniny přechází do organické fáze. Nepochární a málo polární sloučeniny v organické fázi mohou být analyzovány s využitím plynové chromatografie, od níž se odvíjí druh použitého rozpouštědla. Před vlastní analýzou mohou být složky zakoncentrovány s použitím dalších extrakčních technik či pouhým odpařením rozpouštědla [71]. Kritériem pro volbu vhodného rozpouštědla je jeho malá polarita, nízký bod varu a vysoká extrakční kapacita. Mezi nejčastěji používaná rozpouštědla patří dichlormethan, diethylether, *n*-pentan, *n*-hexan nebo jejich směsi [72]. Předností LLE je široký rozsah použitelnosti, dobrá dostupnost vysoce čistých organických rozpouštědel a nenáročnost na zařízení [71].

⁷ **Obohacovací faktor** = je definován jako poměr koncentrace analytu po extrakci a počáteční koncentrace analytu. Tyto koncentrace jsou přímo úměrné množství vzorku před a po extrakci [67].

Perestrello R. a kol. [73] popsal extrakci těkavých látek z červeného vína dichlormethanem s následným zakoncentrováním látek v proudu dusíku. Analýzou plynovou chromatografií s hmotnostní detekcí identifikoval a kvantifikoval 86 analytů v různých koncentracích. V článku **Mihajilova-Krsteva T. M.** [74] byla využita extrakce dichlormethanem pro získání těkavých látek ze srbských destilátů vyrobených z divoce rostoucího ovoce. Konkrétně se jednalo o destiláty z jablka, jahody, ostružiny, černého bezu, slivoně trnky a dalšího ovoce. Následnou plynovou chromatografií s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí bylo identifikováno a kvantifikováno 371 sloučenin.

1.5.2 Extrakce tuhou fází

Extrakce tuhou fází (Solid-Phase Extraction, SPE) je oblíbenou obohacovací technikou přípravy vzorku, která je využívána i pro izolaci a přečištění látek. Její modifikací je mikroextrakce tuhou fází. Extrakce tuhou fází je založena na interakci vzorku s tuhou fází neboli sorbentem, na jehož povrchu dochází k selektivní sorpci vybraných chemických sloučenin. Hnací silou celého procesu je zvýšený tlak nebo naopak vakuum, s jehož pomocí dochází k přefiltrování vzorku přes vrstvu tuhého sorbentu. Sorbované sloučeniny jsou následně ze sorbentu eluovány za použití vhodného rozpouštědla. V případě potřeby může být vzorek přes tuhý sorbent prosáván opakovaně. S vývojem nových technologií dochází k vývoji disků, pipetovacích špiček nebo jamkových destiček [71].

1.5.3 Mikroextrakce tuhou fází

Mikroextrakce tuhou fází (Solid-Phase Microextraction, SPME) představuje jednostupňovou extrakční techniku, vhodnou pro zakoncentrování a izolaci těkavých analytů ze vzorku. Principem je transport a sorpce analytů ze vzorku na křemenné vlákno potažené sorbentem, nebo jinou stacionární fází. Křemenné vlákno je součástí kovového pouzdra, podobného injekční stříkačce pro dávkování v plynové chromatografii. Dostupná jsou vlákna s různou polaritou sorbentu. Nejpoužívanější fází je polydimethylsiloxan (PDMS), polyakrylát, nebo kombinace PDMS a divinylbenzenu (DVB) nebo karboxenu (CAR) [63, 68, 70, 71, 75]. Polydimethylsiloxanová vlákna patří mezi nepolární stacionární fáze a používají se především pro extrakce nepolárních a málo polárních látek [63, 71]. Mikroextrakci tuhou fází lze provádět z plynných, kapalných i tuhých vzorků. Díky vysoké citlivosti je SPME využívána pro izolace stopových organických látek nejen v alkoholických nápojích, ale také ve vodě nebo vzduchu [68, 76] V případě SPME existují dvě možnosti vzorkování těkavých látek. První je přímé vzorkování ponořením aktivní části vlákna do kapaliny. Druhou možností je extrakce látek z plynné fáze nad kapalným či tuhým vzorkem, který se nachází v uzavřené

nádobce. Zmíněná metoda je nazývána jako headspace mikroextrakce tuhou fází (Headspace Solid-Phase Microextraction, HS-SPME). Ponořením vlákna do vzorku dochází k přenosu hmoty a ustavení rovnováhy mezi analyty ve vzorku a stacionární fází na vlákne. Dnes se SPME rutinně spojuje s plynovou chromatografií. Sloučeniny sorbované na vlákne jsou pak tepelně desorbovány v horkém nástřikovém bloku plynového chromatografu. Vlákno je v nástřikovém bloku exponováno vyšší teplotě po určitou dobu tak, aby došlo k úplné desorpci látek z vlákna. Extrakci látek ovlivňuje řada faktorů jako např. druh povlaku vlákna, extrakční čas, doba desorpce, iontová síla a pH roztoku [63, 71, 75].

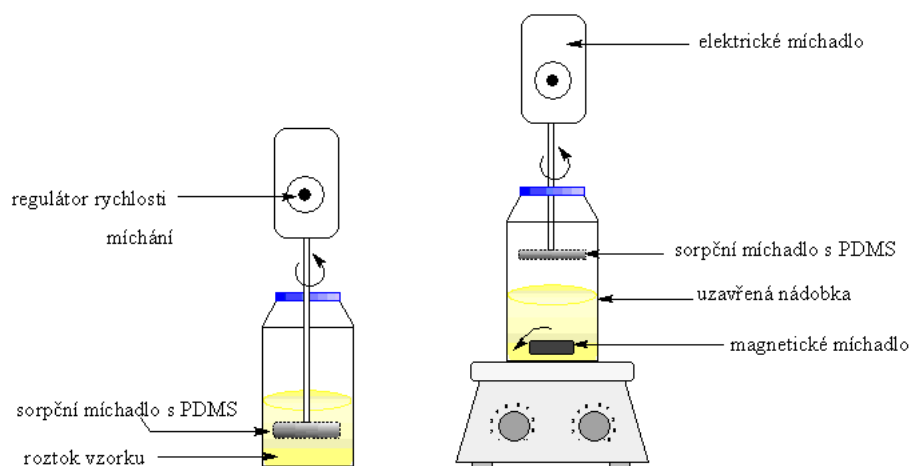
Při extrakci látek z ovocných destilátů technikou HS-SPME je s výhodou využíváno přidavku soli, jakožto elektrolytu, do vzorku. Obecně platí, že přítomnost elektrolytu v sorpčním systému může ovlivnit sorpci dvěma způsoby, a to změnou vlastností fázového rozhraní nebo snížením rozpustnosti hydrofobních sloučenin ve vodné fází, resp. vysolování [70]. Anorganická sůl zvyšuje těkavost stanovovaných látek. Přídavek soli snižuje rozpustnost zejména hydrofobních organických sloučenin, které pak snadněji přechází do parního prostoru nad vzorkem v uzavřené nádobce [77] Vysolovací efekt, v souvislosti s mikroextrakcí tuhou fází, zkoumal ve své práci **Yang X. a kol.** [70], kteří míní, že s rostoucí koncentrací soli dochází u většiny sloučenin ke zvýšení citlivosti analytické i extrakční techniky. Stejný efekt přidavku soli do roztoku vzorku byl prokázán i u headspace vzorkování SPME.

Stejný autor [70] ve své práci porovnával 2 extrakční techniky, konkrétně extrakci tuhou fází a kapalným rozpouštědlem, ve spojení s GC-MS. Většina aromatických látek extrahovaných dichlormethanem (DCM), byly taktéž extrahovány s využitím SPME vlákna, avšak s rozdílným výtěžkem. Citlivost SPME byla srovnatelná či vyšší, než běžná metoda extrakce rozpouštědlem, a to v případě esterů, jako jsou ethyl isovalerát, ethyl hexenoát, isoamyl butyrát, hexenyl acetát. Citlivost extrakce na vlákno byla vyšší i v případě terpenoidů, jako např. linalool, 3-terpineol nebo γ -dekalakton. V případě mastných kyselin byla jejich sorpce velmi slabá, z důvodu nízké afinity vlákna k mastným kyselinám. **Ledauphin J. a kolektiv** [78] využili techniku SPME ve spojení GC-MS pro izolaci a analýzu těkavých látek z francouzského armaňaku, koňaku, kalvadosu a destilátu z mirabelek. Celkem identifikovali a kvantifikovali 207 těkavých látek. **Carla Da Porto** [79] publikovala studii zaměřenou na analýzu pomerančových destilátů. Při výzkumu porovnávala metody headspace extrakce tuhou fází s přímým dávkováním vzorku do plynového chromatografu s hmotnostní detekcí. Srovnáním bylo zjištěno že, přímé dávkování vzorku do plynového chromatografu

s hmotnostní detekcí je citlivější pro polární sloučeniny, jako je methanol, isobutanol, *n*-butanol a isoamylalkoholy, zatímco SPME technika je spíše považována za prostředek k rychlé detekci aromatických látek v destilátu. **Capobiango M.** [80] zkoumal profil těkavých látek v banánovém fermentu pomocí mikroextrakce tuhou fází s využitím GC-MS techniky. Porovnáním profilů těkavých látek bylo zjištěno, že jejich koncentrace závisí na fermentačních podmínkách. Výzkum **Zacaroniho L. M.** [63] byl zaměřen na optimalizaci extrakčních parametrů HS-SPME techniky ve spojení s GC-MS pro analýzu těkavých látek ve vzorcích brazilských destilátů z cukrové třtiny. Headspace mikroextrakci tuhou fází ve spojení s GC-MS ve své práci využil i **García Martín S.** [81], pomocí níž identifikoval a kvantifikoval 22 těkavých sloučenin (alkoholů, esterů, aldehydů a terpenů) v orujo destilátech, vyrobených ze zbytků vylisovaných hroznů po výrobě vína.

1.5.4 Sorpční extrakce na míchadle

Sorpční extrakce na míchadle (Stir-Bar Sorptive Extraction, SBSE) je extrakční technika, při níž dochází k transportu organických látek ze vzorku do vrstvy polymerního filmu na míchadle [71, 82-84]. Stejně jako u SPME může být míchadlo přímo v kontaktu s kapalným či tuhým vzorkem, nebo je umístěno do headspace prostoru nad ním. Tyto možnosti vzorkování jsou zobrazeny na obrázku 3. V HS-SBSE uspořádání je míchadlo zavěšeno v horní části uzavřené nádoby, kde je v kontaktu s parní fází nad kapalným (popř. tuhým) vzorkem, čímž se eliminuje možné znečištění netěkavými interferenty [85]. Magnetické míchadlo je pokryté 0,5 – 1 mm silnou vrstvou polymerního filmu, nejčastěji polydimethylsiloxanem [86]. Výhodou tohoto polymeru je jeho charakteristická difúze a tepelná stabilita, což umožňuje jeho použití v širokém teplotním rozmezí. PDMS taktéž vykazuje velmi nízkou afinitu k alkoholu, proto je s výhodou využíván pro analýzu těkavých látek v alkoholických nápojích [85, 86]. K upravení selektivity polymerního filmu míchadla pro polární látky se používají modifikované či dvoufázové polydimethylsiloxany [87]. Transport látek ze vzorku do polymerního filmu na míchadle je podpořen pohybem míchadla. Vzorkem je obvykle mícháno po dobu 30 až 240 minut tak, aby došlo k extrakci požadovaných složek [71, 82, 83]. Desorpce zachycených organických sloučenin z povrchu míchadla se provádí několika způsoby. Prvním je ponoření míchadla do malého objemu elučního rozpouštědla a uvolnění složek do kapaliny, která je poté přímo dávkována do plynového chromatografického systému [71]. Druhým způsobem je desorpce látek z míchadla v tepelné desorpční jednotce, která je on-line spojena s kapilární kolonou plynového chromatografu [88].



Obrázek 3: Schéma sorpční extrakce na míchadle. Zleva: extrakce z kapalného vzorku a headspace prostoru (převzato z [89]).

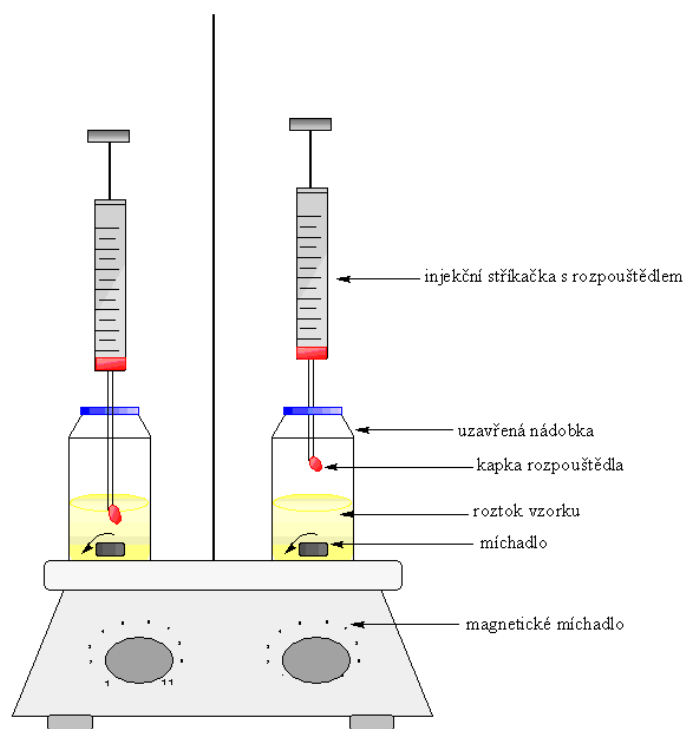
Výhodou této techniky v porovnání se SPME, je silnější vrstva PDMS filmu na míchadle, což zajišťuje vysokou vzorkovací kapacitu, lepší citlivost, nízké detekční limity, dobrou reprodukovatelnost a opakovatelnost výsledků [82, 83, 90]. Celý analytický postup s využitím SBSE však vyžaduje předchozí optimalizaci extrakčních (doba extrakce, rychlost míchání, teplota, atd.) a desorpčních parametrů (teplota a doba desorpce) [82].

Delgado R. a kol. [82] využil sorpční extrakci na míchadle ve spojení s GC-MS pro analýzu těkavých látek ve španělském destilátu z vína. **Diez a kol.** [91] publikoval o využití SBSE k analýze těkavých ethyl- a vinyl fenolů ve víně. Porovnání SBSE a SPME techniky provedl **Alves** [88] ve své studii při analýze vína z 5 odrůd révy. Studie potvrdila, že lepších výsledků pro zachycení stopových a ultrastopových množství složek dosahuje sorpční extrakce na míchadle. **Durán Guerrero a kol.** [83, 90] optimalizoval a ověřil metodiku sorpční extrakce na míchadle při analýze těkavých látek v octu. **Zhou a kol.** [86] publikoval o použití SBSE ve spojení s GC-MS k analýze těkavých fenolů, které jsou běžně obsaženy v pivě, víně a jiných alkoholických nápojích.

1.5.5 Mikroextrakce jednou kapkou

Mikroextrakce jednou kapkou (Single Drop Microextraction, SDME) je taktéž známá pod názvem mikroextrakce kapalnou fází, mikroextrakce rozpouštědlem nebo mikroextrakce mezi dvěma kapalnými fázemi [71]. Mikroextrakce jednou kapkou je analogií k mikroextrakci tuhou fází, avšak s rozdílem, že látky jsou transportovány a sorbovány kapkou organického rozpouštědla, visící na špičce mikrostríkačky. Kapka na mikrostríkačce je ponořena do kapalného vzorku nebo vystavena do parního prostoru nad kapalným či tuhým vzorkem (Headspace Solid-Phase Microextraction, HS-SDME), jak je zobrazeno na obrázku 4 [92-94].

Kapka je tvořena organickým rozpouštědlem nemísitelným s vodou nebo vnitřním standardem. Nejpoužívanějším rozpouštědlem, díky své nízké rozpustnosti ve vodě je toluen [71, 72, 95]. Mezi další rozpouštědla vhodná pro SDME patří např. dichlormethan, dimethyl sulfoxid, propyl benzoát, *n*-oktan, *n*-dekan, *o*-xylen nebo ethylenglykol [96, 97]. Do injekční stříkačky je nasát asi 1 μl rozpouštědla, jehož jedna kapka je poté vytlačena a zachycena na konci jehly. K extrakci analytů dochází ponořením kapky rozpouštědla na jehle do roztoku, či umístěním do headspace prostoru v uzavřené nádobce. K zintenzivnění transportu jednotlivých složek vzorku může být taktéž roztokem mícháno, s využitím magnetického míchadla. Sorpce organických látek ze vzorku do kapky rozpouštědla na jehle probíhá asi 30 minut. Po skončení extrakce je kapka zasunuta zpět do stříkačky a přenesena do nástřikového bloku plynového chromatografu k analýze [71, 72, 95].



Obrázek 4: Schéma mikroextrakce jednou kapkou. Zleva: Vzorkování z kapalného vzorku, odběr vzorku z headspace prostoru nad vzorkem (převzato z [94]).

SDME představuje rychlou, jednoduchou techniku extrakce a zakoncentrování těkavých organických sloučenin z vodných roztoků [71, 94]. Výhodou této techniky jsou nízké náklady na analýzu, úplná obnovitelnost kapky za zanedbatelné náklady, dobrá přesnost a citlivost, které jsou získány v krátkém čase [98]. Drobnou nevýhodou je složitost výběru organického rozpouštědla, které je schopno vytvářet a zachovávat kapky ulpívající na konci jehly stříkačky [71].

Předmětem práce **Xiao a kol.** [94] bylo porovnání 3 extrakčních technik HS-SPME, HS-SDME a přímé SDME při analýze těkavých sloučenin síry, které byly obsaženy v pivech a nápojích. Analyzovány byly např. dimethyl sulfid (DMS), diethyl sulfid (DES) nebo dimethyl disulfid (DMDS) technikou plynové chromatografie s plamenově-fotometrickou detekcí (GC-FPD). **Hashemi a kol.** [98] použili HS-SDME ve spojení s plynovou chromatografií s plamenově-ionizačním detektorem pro rychlé stanovení cyklamátu, resp. umělého sladidla, v nápojích. Extrakci jednou kapkou ve spojení s plynovou chromatografií s detektorem elektronového záchyty (GC-ECD) použil i **Wardencki W. a Curylo J.** [99] při studiu karbonylových sloučenin ve vodce. Před chromatografickou analýzou bylo však nutno provést derivatizaci karbonylových sloučenin.

1.6 Analýzy těkavých látek

1.6.1 Plynová chromatografie

Plynová chromatografie (Gas Chromatography, GC) je v současné době nejdůležitější a nejpoužívanější technikou v oblasti analýzy alkoholických nápojů. Výhodou plynové chromatografie je vysoké rozlišení (více jak 200 000 pater/kolonu) a extrémní citlivost (limit detekce = pg), což umožňuje analýzy složitých směsí látek [5]. Velmi často se plynová chromatografie spojuje s extrakčními technikami, které slouží pro izolaci látek z matrice a jejich zakoncentrování [68]. GC je univerzální technikou jak pro sledování obsahu alkoholu, určení těkavých látek, tak i k určení stopových nečistot v nápojích [5]. Některé polární a netěkavé látky mohou být taktéž analyzovány plynovou chromatografií, avšak po předchozí derivatizaci, která vede ke snížení bodu varu nebo změně polaritě látek [100]. Pro těkavé sloučeniny se používají kapilární chromatografické kolony, zejména s málo až středně polární stacionární fází, difenyl dimethylpolysiloxanem. Stejných výsledků dosahují vysoce polární polyethylenové kolony (PEG) [5]. Důležitým parametrem separačního procesu je délka, průměr kolony a druh stacionární fáze. Obecně platí, že v delších kolonách dochází k lepšímu rozlišení píků. K lepšímu rozlišení blízké eluujících píků dochází i při separaci látek na kolonách s menším průměrem. Výhodou úzkých kolon je taktéž přítomnost tenkého filmu stacionární fáze, což přispívá k lepšímu přenosu hmoty mezi mobilní a stacionární fází a taktéž přispívá k vyššímu rozlišení [100]. K univerzálním a zároveň nejpoužívanějším detektorům patří plamenově-ionizační (Flame-Ionization Detector, FID) a hmotnostní detektor (Mass Spectrometry, MS) [5, 100]. Princip detekce plamenovou ionizací spočívá v měření změny ionizačního proudu, v důsledku ionizace látek obsažených v eluátu z kolony.

Proud je úměrný hmotnosti iontů, resp. celkové hmotnosti uhlíku a vodíku v molekule. FID je destruktivní, avšak univerzální detektor s odezvou pro většinu organických látek [101]. Plynová chromatografie s hmotnostní detekcí je v současné době nejcitlivější a nejvýkonnější technikou [68].

Identifikace sloučenin pomocí chromatografických metod je založena na porovnání retenčních časů, resp. retenčních indexů (Retention Indices, RI) jednotlivých látek a jejich hmotnostních spekter s databázemi. Systém identifikace látek podle jejich retenčních indexů zavedl poprvé Kovats. K vytvoření stupnice, do níž jsou vynášena retenční data, je nutno zvolit vhodnou homologickou řadu sloučenin. V plynové chromatografii se jako standard používá homologická řada nerozvětvených n -alkanů. Každému atomu uhlíku je pak přiřazena hodnota 100, proto např. RI n -pentanu je roven hodnotě 500. Pro izotermální měření byly zavedeny Kovatsovy RI, jejichž výpočet uvádí rovnice (3).

$$RI = 100 \cdot \frac{\log(t'_x) - \log(t'_z)}{\log(t'_{z+1}) - \log(t'_z)} + 100 \cdot z \quad (3)$$

kde t'_x, t'_z, t'_{z+1} jsou redukované retenční časy látky, n -alkanu se z uhlíky a n -alkanu se $z+1$ uhlíky. Při stanovení retenčního indexu platí, že retenční časy n -alkanů jsou voleny tak, aby v mezi nimi eluovala stanovovaná látka.

Analogií jsou van Den Doolovy a Kratzovy RI, které jsou navrženy pro neizotermální průběh měření, tedy teplotně programované analýzy. Výpočet van Den Doolových a Kratzových RI se provádí podle rovnice (4) [102, 103].

$$RI = 100 \cdot \frac{t'_x - t'_z}{t'_{z+1} - t'_z} + 100 \cdot z \quad (4)$$

Plynovou chromatografii s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí porovnávala ve své studii **A. Ziolkowska** [104]. Tyto separační techniky byly spojeny navíc s mikroextrakcí tuhou fází. Analyzovány byly vzorky destilátů z žita, kukuřice a brambor. V profilech těkavých látek získaných SPME-GC-MS dominovaly ethylestery mastných kyselin, zatímco v profilech z SPME-GC-FID převládaly fuselové alkoholy a ethyl acetát. O spojení plynové chromatografie s plamenově-ionizační detekcí publikoval **Satora P. a kol.** [105], který jej využil ke kvantitativní analýze těkavých látek v různých druzích švestkových destilátů, které byly vyrobeny samovolnou fermentací. Celé měření doplňuje o kvalitativní analýzu těkavých látek pomocí GC-MS, při níž využívá i SPME pro jejich izolaci ze švestkového destilátu.

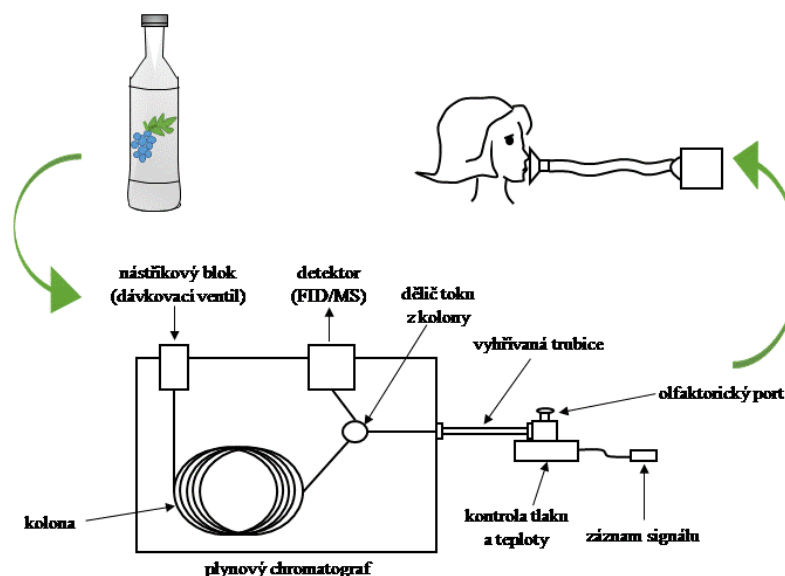
Rodriguez-Solana R. [106] publikovala článek o studiu profilů těkavých látek v lihovině z plodů fíkovníku. Pro kvantifikaci těkavých látek ve fíkovém alkoholu a jejich porovnání se sušenými fíky byla použita GC-FID analýza. Kvalitativní analýzou těkavých látek pomocí HS-SPME/GC-MS bylo identifikováno 130 těkavých sloučenin.

1.7 Senzorická analýza ovocných destilátů

1.7.1 Olfaktometrická analýza

Olfaktometrická analýza využívá lidského nosu k detekci těkavých látek. Principem je individuální čichání eluátu z chromatografické kolony a kvalitativní, příp. i kvantitativní hodnocení vůní jednotlivých frakcí [100]. Hodnocení je prováděno vyškolenou osobou či skupinou hodnotitelů, kteří vztahují aromatické zobrazení pachů k retenčním časům. Je třeba zmínit, že lidský nos je schopný detekovat a rozlišit těkavé látky na úrovni 10^{-17} g, zatímco běžné chromatografické detektory vyžadují alespoň 10^{-13} g. Hodnocení čichem se provádí přes teflonovou či skleněnou trubici zakončenou kuželovým nástavcem na nos, která je napojena na plynový chromatograf, což je zobrazeno na obrázku 5. Olfaktometrická detekce ve spojení s plynovou chromatografií (Gas Chromatography-Olfactometry, GC-O) probíhá paralelně s detekcí plamenově-ionizační, či hmotnostní, která umožňuje následnou identifikaci odorantních zón na chromatogramu. Nejpoužívanější je simultánní detekce olfaktometrem a hmotnostním spektrometrem, která se provádí dělením elučního proudu z kolony. Mezi záznamy odezvy z obou detektorů, v závislosti na retenčních časech jednotlivých složek eluátu mohou vznikat niance. Odstranění odchylky mezi retenčními časy obou detektorů lze provést instalací restriktoru, kterým se reguluje průtok plynů. Každá sloučenina, která eluuje z kolony a je detekována čichem hodnotitele může být charakterizována detekčním prahem (přítomnost zápachu), kvalitou, intenzitou a dobou trvání zápachu [107, 108]. Výsledkem olfaktometrického měření je aromagram, tedy závislost intenzity odezvy na retenčním čase, kdy se ke každému píku zaznamenává navíc charakteristika vjemu [107, 109].

GC-O je považována za průlomovou techniku v senzorické analýze, neboť kombinuje rozlišení kapilárních chromatografických kolon se selektivitou a citlivostí lidského nosu. Umožňuje určit vztah mezi složením alkoholického nápoje, obsahem těkavých látek a jejich organoleptickými vlastnostmi [5].



Obrázek 5: Schematické zapojení plynového chromatografu s olfaktometrickou detekcí (převzato z [108]).

Zajímavou aplikací GC-O byl výzkum aromatických látek ve víně Chardonnay provedený **A. Buettnerem** [110]. Aromatické látky byly z vína extrahovány pomocí sorpční extrakce na míchadle, z něhož byly v nástřikovém bloku plynového chromatografu desorbovány a na odtoku z kolony detekovány čichem několika posuzovatelů. Paralelně probíhala i detekce pomocí hmotnostní spektrometrie. **Escudero A. a kol.** [111] publikovala článek o izolaci a identifikaci odorantů vznikajících oxidací vína. Vliv oxidace na složení vína byl sledován simultánně pomocí vysokorozlišovací plynové chromatografie s hmotnostní a olfaktometrickou detekcí. Zjištěna byla přítomnost 19 odorantů nově vzniklých oxidací a zároveň vymizení několika původních látek, které se ve víně nacházely před oxidací. **Maria de Souza a kol.** [112] studovala složení aromatických látek s využitím GC-O v destilátech z cukrové třtiny, konkrétně v rumu a cachaça. Olfaktometrickou analýzu ve spojení s plynovou chromatografií využila i **Šístková a kol.** [109] pro identifikaci senzory aktivních látek v minerálních vodách s citronovou příchutí. **Corsini L. a spol.** [113] publikovala o využití GC-O při identifikaci senzory aktivních látek v různých druzích octa Balsamico.

1.7.2 Hodnocení ovocných destilátů podle chuti a vůně

Ovocné destiláty jsou hodnoceny na základě senzory aktivních znaků, konkrétně tedy chuti a vůně. Testování probíhá skupinou degustátorů, kteří pomocí smyslového hodnocení odhalí přítomnost pozitivně i negativně působících látek a popíší je pomocí přívlastků. Prvním kritériem destilátu je čistota, tedy typicky ovocné aroma. Destilát nesprávné čistoty vzniká zpracováním nezdravého ovoce, nesprávným kvašením nebo špatným oddělením úkapu

a dokapu od jádra. Projevem je přítomnost octanu ethylnatého, acetaldehydu, kyseliny octové a vyšších alkoholů. Plísňový a zatuchlý zápach může být znakem kontaminované suroviny nebo špatně vymyté kvasné nádoby. Ethanol je nosičem všech aromatických látek v destilátu, proto se při testování vztahuje jeho vůně a chuť na čistý ethanol. Čistý ethanol je vnímán jako s výdechem alkoholický, v ústech lehce nasládlý a lehce pálivý alkohol. Při správném sensorickém testování a porovnávání ovocných destilátů jsou jednotlivé vzorky nality ve sklenkách o stejném objemu. Optimální teplota testovaného destilátu je pak mezi 18 až 20 °C [46].

1.8 Statistická analýza dat

1.8.1 Ortogonální projekce do latentních struktur

Statistická metoda ortogonální projekce do latentních struktur (Orthogonal Projections to Latent Structures, OPLS) je modifikací metody projekce do latentních struktur (Projections to Latent Structures, PLS) [114]. Projekce do latentních struktur je využívána pro analýzy multivariačních dat a pracuje metodou částečně nejmenších čtverců. Smyslem PLS je popsat a kvantifikovat vztah mezi maticí nezávisle proměnných \mathbf{X} (matice prediktorů) a závisle proměnných \mathbf{Y} (matice odezvočných proměnných) a maximalizovat korelaci mezi nimi. Využívá se také v oblasti multivariační kalibrace, klasifikace a diskriminační analýzy složitých dat získaných z chromatografických a spektrálních technik. Metodika výpočtu latentních proměnných je shodná s metodou hlavních komponent ve variantě NIPALS. Nelineární iterační algoritmus nejmenších čtverců (Nonlinear Iterative Partial Least Squares, NIPALS) vychází z představy lineární regrese. Cílem ortogonální projekce do latentních struktur je odstranit systematické informace ze vstupní datové sady nekorelovaných nezávisle proměnných \mathbf{X} pro vysvětlení závisle proměnných \mathbf{Y} , jinými slovy dochází k odstranění variability matice nezávisle proměnných \mathbf{X} , která je ortogonální k matici závisle proměnných \mathbf{Y} [114-119]. OPLS model je schopen zvládnout problémy s vážnou multikolinearitou, resp. vysokou vzájemnou korelací v matici prediktorů. Multikolinearita v OPLS je příznivá, neboť zvyšuje prediktivitu modelu [115]. OPLS metoda spojuje závisle proměnné \mathbf{Y} a nezávisle proměnné \mathbf{X} pomocí lineárního multivariačního modelu, který uvádí rovnice (5). Tento korelační vztah je vyjádřen pomocí prediktivní komponenty \mathbf{P} a ortogonální komponenty \mathbf{O} . Komponenta \mathbf{O} popisuje vztah mezi systematickou variabilitou \mathbf{X} , nesouvisející s \mathbf{Y} , kdežto \mathbf{P} vyjadřuje korelační souvislost mezi \mathbf{X} a \mathbf{Y} [120]. S každou ortogonální komponentou model provede rotaci, čímž je vysvětlen určitý podíl matice závisle

proměnných \mathbf{Y} . Variabilita jedné závisle proměnné \mathbf{Y} je pak vysvětlena pouze jednou prediktivní komponentou, ale několika ortogonálními. Nakonec jsou extrahovány významné komponenty a navíc podíl z variability \mathbf{Y} [120, 121]. Po standardizaci proměnných lze tento model popsat a vyjádřit následující rovnicí:

$$\begin{aligned}\mathbf{X} &= \mathbf{T}_P \mathbf{P}_P^T + \mathbf{T}_O \mathbf{P}_O^T + \mathbf{E} \\ \mathbf{Y} &= \mathbf{T}_P \mathbf{C}_P^T + \mathbf{F}\end{aligned}\quad (5)$$

kde \mathbf{X} je matice s prediktory pro n subjektů, \mathbf{Y} je matice závisle proměnných pro n subjektů; \mathbf{T}_P je matice skóru pro n subjektů z p prediktivních komponent extrahovaných z \mathbf{X} ; \mathbf{T}_O je matice skóru pro n subjektů z o ortogonálních komponent extrahovaných z \mathbf{X} (nekorelují s \mathbf{Y}); \mathbf{P}_P je matice komponentních vah pro p prediktivních komponent extrahovaných z \mathbf{X} ; \mathbf{P}_O je matice komponentních vah pro o ortogonálních komponent extrahovaných z \mathbf{X} (nekorelují s \mathbf{Y}); \mathbf{E} a \mathbf{F} jsou matice reziduí (chyb) [115].

1.8.2 Shluková analýza

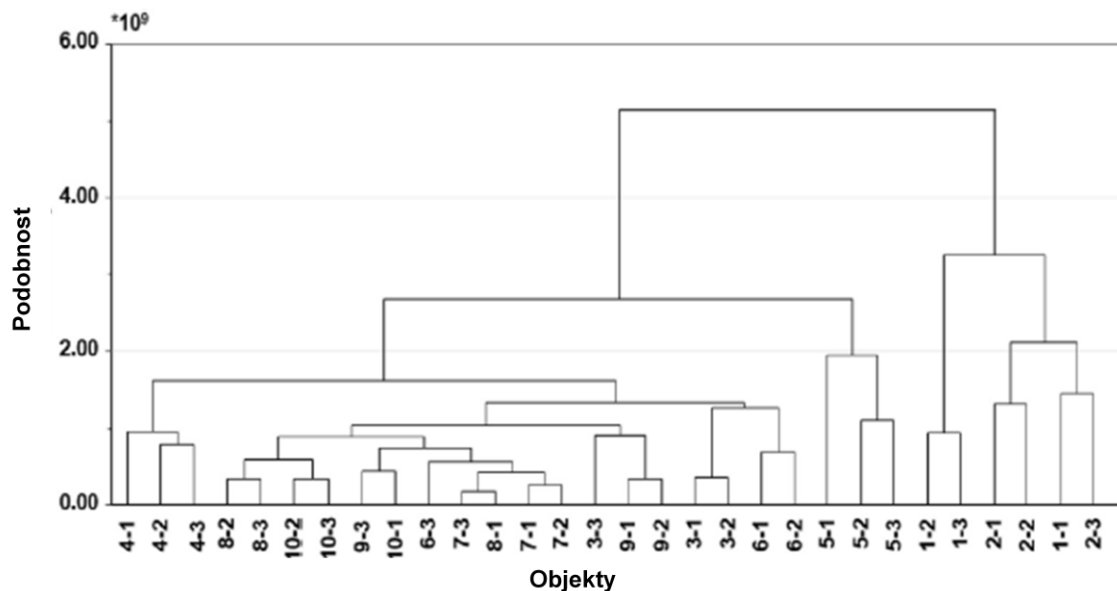
Shluková analýza je soubor postupů, který na základě podobnosti objektů, umožňuje kategorizovat objekty do několika shluků. Podle způsobu shlukování se metody shlukové analýzy rozdělují na hierarchické a nehierarchické, z nichž hierarchické se rozlišují ještě na aglomerativní a divizní postupy. Principem aglomerativních postupů je postupné spojování objektů, příp. shluků do jediného. Druhým způsobem jsou divizní postupy, které jsou inverzní k aglomerativním. Principem je postupné rozdělování jednoho shluku, čímž umožňují získat systém podshluků či jednotlivých objektů [117].

1.8.2.1 Hierarchická analýza shluků

Podstatou hierarchické analýzy shluků (Hierarchical Clustering Analysis, HCA) je postupné spojování objektů či jejich shluků do dalších, větších shluků, v závislosti na jejich podobnosti. Výsledky jsou zaznamenávány pomocí stromového diagramu, zvaného dendrogram. Na vertikální ose pozorujeme hladinu spojování, na horizontále pak začíná strom s n -větvemi, z nichž v každém kroku dochází ke spojení právě dvou větví [117, 122-124].

Sestavení dendrogramu umožňuje vizualizaci podobnosti vzorků v analýze [122]. Základním algoritmem HCA je přiřazení každého objektu k jinému objektu, či k již existujícímu shluku, na základě jejich vzdáleností. Shluky jsou spojovány do doby, než vznikne předem daný počet shluků, případně jeden jediný shluk, zahrnující všechny objekty, jak je zobrazeno

na obrázku 6. V druhém případě jsou finální shluky získány „řezáním stromu“ na různých úrovních, resp. různých spojovacích hladinách, v závislosti na použité metodě měření vzdáleností [125].



Obrázek 6: Ukázka dendrogramu (převzato z [126]).

Dendrogramy se taktéž dají sestavovat z proměnných, což zajišťuje jejich vzájemnou korelaci. Mírou správnosti dendrogramu je korelační koeficient. Vysoká hodnota korelačního koeficientu poukazuje na vysokou podobnost proměnných, či objektů [123, 124].

U aglomerativních metod existuje několik variant shlukování, z nichž můžeme jmenovat metodu nejbližšího a nejdálčenějšího souseda, metodu průměrovou, centroidní, mediánovou či Wardovu. Principem **metody nejbližšího souseda** je shlukování jednotlivých objektů, či shluků na základě nejkratší vzdálenosti mezi nimi. **Metoda nejdálčenějšího souseda** je obdobou výše uvedené metody, avšak s rozdílem, že shlukování je prováděno na základě největší vzdálenosti mezi objekty, z nichž každý je z jiného shluku. Tato metoda je nejpoužívanější. **Průměrová metoda** vychází z výpočtu mezishlukové vzdálenosti, na základě průměrné vzdálenosti mezi všemi objekty. Největší podobnost mají shluky s nejmenší průměrnou vzdáleností všech svých objektů. **Wardova metoda** používá jako kritérium pro spojování shluků přírůstek celkového vnitroskupinového součtu čtverců odchylek pozorování od odhadu střední hodnoty datového souboru. **Centroidní metoda** počítá vzdálenost shluků jako euklidovskou vzdálenost jejich těžišť. Opět jsou nejpodobnější ty shluky, které mají nejkratší vzdálenost svých těžišť [117, 123, 124].

Cesar L. K. a kol. [126] úspěšně použil hierarchickou analýzu shluků k identifikaci chemických interferencí při analýze rostlinných metabolitů s použitím plynové chromatografie s hmotnostní detekcí.

2 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

Tato část diplomové práce popisuje postup analýzy ovocných destilátů. Cílem bylo jednak rozlišit jednodruhové destiláty podle druhu ovoce, ze kterých byly vyrobeny, a také identifikovat těkavé látky ve vzorcích speciálních druhů destilátů. Vzorky ovocných destilátů byly analyzovány pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí. Před vlastní analýzou byly těkavé látky z ovocného destilátu izolovány a zakoncentrovány headspace technikou mikroextrakce tuhou fází. Kvalitativní složení destilátů bylo zjištěno na základě GC-MS analýzy, porovnáním vypočtených retenčních indexů složek a porovnáním hmotnostních spekter daných látek s knihovnamí. Kvantitativní analýza ovocných destilátů byla provedena pomocí GC-FID měření, čímž bylo získáno relativní zastoupení daných složek v aromaprofilu.

2.1 Vzorky a chemikálie

2.1.1 Příprava vzorků ovocných destilátů

Pro diplomovou práci byly shromážděny vzorky ovocných destilátů z různých částí České republiky. Destiláty byly získány od pěstitelů, kteří zaručili jejich jednodruhový původ. Jednalo se o destiláty vyprodukované v domácích a pěstitelských pálenicích. Analyzováno bylo celkem 63 vzorků, a to jak z tradičního ovoce, tak i speciálních druhů ovocných či jiných plodin (viz tabulka 1). Bylo analyzováno celkem 52 vzorků destilátů z tradičního ovoce, a to z jablek (15 vzorků), hrušek (9), meruněk (5) švestek (15) a slivoní mirabelky (8). Zbýlých 11 vzorků méně obvyklých druhů pálenek bylo vyrobeno ze speciálních druhů surovin, jako jsou ořech, bezinky, květ černého bezu, dýně, malina, višně, vinná réva a mandle. Vzorky ovocných destilátů se liší druhem ovoce, datem a místem pálení kvasu. Přesné podmínky kvašení a destilace pálenek nejsou známy. Všechny odebrané vzorky byly po destilaci uchovávány v uzavřených nádobkách v temnu a chladu.

2.1.2 Použité chemikálie

Chlorid sodný od firmy Lach-Ner s.r.o. (Neratovice, Česká republika). Demineralizovaná voda byla purifikována s použitím systému Mili-Q[®] od firmy Merck KGaA (Darmstadt, Německo). *n*-Hexan, jako rozpouštědlo a standard *n*-alkanů C8 – C40, rozpuštěných v *n*-hexanu byly zakoupeny od Sigma-Aldrich (Praha, Česká republika). Vlákno pro mikroextrakci tuhou fází se 100 μm vrstvou polydimethylsiloxanu (100 μm PDMS) bylo zakoupeno od firmy Supelco (Bellefonte, PA, USA).

Tabulka 1: Označení ovocných destilátů pro statistickou analýzu (vzorky označené „*“ byly pokládány za neznámé při ověřování schopnosti predikce vypracovaného statistického modelu - kap. 3.3).

| Číslo vzorku | Ovocný druh destilátu | Označení vzorku | Číslo vzorku | Ovocný druh destilátu | Označení vzorku |
|--------------|-----------------------|-----------------|--------------|-----------------------|-------------------|
| 1 | Hruškovice | HR07 | 41 | Švestka | SV42 |
| 2 | Hruškovice | HR10 | 42 | Švestka | SV43 |
| 3 | Hruškovice | HR11 | 43 | Švestka | SV47 |
| 4 | Hruškovice | HR18 | 44 | Švestka | SV56 |
| 5 | Hruškovice | HR48 | 45 | Slivovice | SV58 |
| 6 | Hruškovice | HR52 | 46 | Slivovice | SV61 |
| 7 | Hruškovice | HR53 | 47 | Slivovice | SV62 |
| 8 | Hruškovice | HR74 | 48 | Hruškovice* | HR49 |
| 9 | Jablkovice | JA24 | 49 | Jablkovice* | JA37 |
| 10 | Jablkovice | JA32 | 50 | Jablkovice* | JA65 |
| 11 | Jablkovice | JA38 | 51 | Slivovice* | SV34 |
| 12 | Jablkovice | JA39 | 52 | Slivovice* | SV57 |
| 13 | Jablkovice | JA40 | 53 | Ořechovice* | 1_ořech |
| 14 | Jablkovice | JA46 | 54 | Bezinkovice* | 28_bezinky |
| 15 | Jablkovice | JA50 | 55 | Dýňovice* | 29_dýně |
| 16 | Jablkovice | JA51 | 56 | Malinovice* | 31_malina |
| 17 | Jablkovice | JA54 | 57 | Pampeliškovice* | 35_pampeliška |
| 18 | Jablkovice | JA55 | 58 | Žitná* | 36_žito |
| 19 | Jablkovice | JA70 | 59 | Bezovice* | 41_černý bez květ |
| 20 | Jablkovice | JA78 | 60 | Višňovice 1* | 45_višeň |
| 21 | Jablkovice | JA80 | 61 | Višňovice 2* | 79_višeň |
| 22 | Meruňkovice | ME16 | 62 | Vínovice* | 80_vínovice |
| 23 | Meruňkovice | ME20 | 63 | Mandlovice* | 82_mandlovice |
| 24 | Meruňkovice | ME44 | | | |
| 25 | Meruňkovice | ME59 | | | |
| 26 | Meruňkovice | ME60 | | | |
| 27 | Mirabelkovice | MI12 | | | |
| 28 | Mirabelkovice | MI17 | | | |
| 29 | Mirabelkovice | MI30 | | | |
| 30 | Mirabelkovice | MI64 | | | |
| 31 | Mirabelkovice | MI66 | | | |
| 32 | Mirabelkovice | MI71 | | | |
| 33 | Mirabelkovice | MI81 | | | |
| 34 | Mirabelkovice | MI84 | | | |
| 35 | Slivovice | SV03 | | | |
| 36 | Slivovice | SV14 | | | |
| 37 | Slivovice | SV15 | | | |
| 38 | Slivovice | SV22 | | | |
| 39 | Slivovice | SV27 | | | |
| 40 | Slivovice | SV33 | | | |

2.2 Mikroextrakce tuhou fází v headspace uspořádání

Těkavé látky byly ze vzorku izolovány pomocí mikroextrakce tuhou fází v headspace uspořádání, resp. z parního prostoru nad vzorkem v uzavřené nádobce. Optimalizované experimentální podmínky pro HS-SPME byly převzaty z publikace **Bajer a kol.** [127]. Do headspace vialek byly odpipetovány vždy 2 ml vzorku ovocné pálenky a 8 ml roztoku chloridu sodného o koncentraci 28,5 % (w/v). Příklad roztoku chloridu sodného ovlivňuje rovnováhu mezi kapalným vzorkem a parní fází, a díky tomu jsou těkavé látky efektivněji transportovány do parní fáze. Headspace nádoby byly uzavřeny teflonovým septem. Pro zajištění ustálených podmínek, byly takto připravené vzorky nejprve vyhřívány na teplotu 45 °C po dobu 20 minut. Extrakce těkavých látek z parního prostoru nad vzorkem probíhala na nepolárním vlákne 100 µm PDMS, při teplotě 45 °C po dobu 60 minut. Po uplynutí této doby byly těkavé látky z vlákna desorbovány v nástřikovém bloku plynového chromatografu. Desorpce látek probíhala při 200 °C po dobu 15 s. Mezi analýzami jednotlivých vzorků bylo vlákno tepelně čištěno, konkrétně při 250 °C.

2.3 Plynová chromatografie

Pro separaci těkavých látek byl použit plynový chromatograf GC-2010 Plus s plamenově-ionizačním detektorem v kombinaci s hmotnostním detektorem QP-2010 Plus od firmy Shimadzu (Kyoto, Japonsko). Vzorky byly dávkovány pomocí autosampleru Combi PAL (CTC Analysis AG, Zwingen, Švýcarsko), doplněného o ohřívací jednotku pro automatickou HS-SPME. Separace látek probíhala na kapilární koloně SBL-5MS (Supelco, Bellefonte, PA, USA) o délce 30 m a vnitřním průměru 0,25 mm. Tloušťka vrstvy stacionární fáze byla 0,25 µm. Stacionární fáze obsahovala 5 % difenyl- a 95 % dimethylpolysiloxanu. Jako nosný plyn bylo použito helium 5.0 od firmy Linde Gas a. s. (Praha, Česká republika). Konstantní lineární rychlost toku nosného plynu byla nastavena na hodnotu 30 cm/s. Nástřikový blok plynového chromatografu byl vytemperován na 200 °C. Po zplynění vzorku v nástřikovém bloku, bylo provedeno dávkování vzorku ve splitovacím módu⁸ při splitovacím poměru 1:20. Separace látek na koloně probíhala v programovaném teplotním režimu, který byl nastaven následovně: 40 °C (3 min), 2 °C/min → 250 °C (12 min). Všechny optimalizované podmínky pro chromatografickou analýzu těkavých látek v ovocných destilátech byly převzaty z publikace **Bajer a kol.** [127].

⁸ Splitovací mód = množství zplyněného vzorku nastřikovaného na kolonu se dělí v určitém poměru, a jeho větší část se odstraňuje tak, aby nedošlo k přesycení kolony i detektoru.

Pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí byly analyzovány jak vzorky ovocných destilátů, tak i standard *n*-alkanů. Retenční časy *n*-alkanů sloužily k výpočtu retenčních indexů jednotlivých látek.

2.3.1 Podmínky plamenově-ionizační detekce

Teplota plamenově-ionizačního detektoru byla nastavena na 270 °C. Spalování látek probíhalo v plameni ze směsi vodíku a vzduchu. Průtok vodíku v detektoru byl nastaven na hodnotu 40 ml/min a průtok vzduchu na 400 ml/min. Jako make-up plyn byl použit dusík, jehož průtok byl 30 ml/min.

2.3.2 Podmínky hmotnostního spektrometru

Hmotnostní spektrometr QP-2010 Plus byl vybaven elektronovou ionizací (EI). Hodnota ionizační energie byla nastavena na 70 eV. Teplota na vstupu do hmotnostního spektrometru a teplota ionizačního zdroje byla 200 °C. V režimu SCAN byly detekovány ionty v rozsahu hodnot m/z 33 až 500. Měření a záznam signálu byl spuštěn až po 5,5 min (tzv. „solvent cut time“), kvůli ochraně detektoru.

2.4 Vyhodnocení chromatografických dat

Analýzou ovocných destilátů plynovou chromatografií ve spojení jak s plamenově-ionizační, tak i hmotnostní detekcí byly získány chromatogramy, tedy záznamy závislosti intenzity odezvy na retenčním čase. Vyhodnocení chromatogramů bylo provedeno v programech GC Solution a GCMS Solution 4.20, od firmy Shimadzu (Kyoto, Japonsko). Experimentální data byla vyhodnocena s ohledem na účel měření.

2.4.1 Identifikace těkavých látek ve speciálních destilátech

Pro získání aromaprofilu těkavých látek ve speciálních druzích destilátů byly použity analýzy GC-MS a GC-FID. GC-FID analýza byla provedena třikrát a GC-MS analýza byla provedena jednou pro každý vzorek. GC-MS analýza byla provedena za účelem identifikace sloučenin, zatímco GC-FID analýzy za účelem výpočtu relativního zastoupení identifikovaných sloučenin v aromaprofilech jednotlivých vzorků destilátů. Pro identifikaci látek v ovocných destilátech byla naměřena i homologická řada *n*-alkanů, a to za stejných podmínek jako vzorky. S pomocí retenčních časů *n*-alkanů a retenčních časů látek z ovocného destilátu, na základě van Den Doolova vztahu (viz rovnice 4) pro programované teplotní měření, byly vypočteny retenční indexy (RI). Retenční časy *n*-alkanů a k nim vypočtené hodnoty retenčních indexů uvádí tabulka 2. Identifikace látek probíhala na základě porovnání RI látek

a hmotnostních spekter s knihovnami spekter FFNSC, NIST 14 a NIST 14s nebo s internetovými sborníky dat. Identifikované látky byly nakonec rozřazeny do skupin podle typu látky a ovocného druhu pálenky, z níž pochází.

Z chromatogramů, získaných z GC-FID analýzy, byla po integraci extrahována chromatografická data (retenční časy všech látek a k nim příslušné plochy píků). Retenční časy byly přepočteny na retenční indexy a plochy píků na relativní zastoupení jednotlivých píků v chromatogramu. Do relativního zastoupení sloučenin v aromaprofilu byly započítány pouze píky s hodnotou retenčního indexu 800 a více. Data ze tří měření pro každý vzorek byla zprůměrována. K průměrným hodnotám relativního zastoupení látek byla vypočtena výběrová směrodatná odchylka. K takto upraveným GC-FID datům byly na základě porovnání RI z GC-FID a GC-MS analýz přiřazeny identifikované sloučeniny.

Tabulka 2: Retenční časy *n*-alkanů a k nim vypočtené retenční indexy.

| Název alkanu | Počet uhlíků | Retenční časy (FID) [min] | Retenční časy (MS) [min] | Retenční indexy [-] |
|----------------------|--------------|------------------------------|-----------------------------|------------------------|
| <i>n</i> -oktan | 8 | 7,784 | 7,469 | 800 |
| <i>n</i> -nonan | 9 | 13,110 | 12,698 | 900 |
| <i>n</i> -dekan | 10 | 19,897 | 19,434 | 1000 |
| <i>n</i> -undekan | 11 | 27,171 | 26,700 | 1100 |
| <i>n</i> -dodekan | 12 | 34,378 | 33,923 | 1200 |
| <i>n</i> -tridekan | 13 | 41,287 | 40,850 | 1300 |
| <i>n</i> -tetradekan | 14 | 47,848 | 47,425 | 1400 |
| <i>n</i> -pentadekan | 15 | 54,059 | 53,652 | 1500 |
| <i>n</i> -hexadekan | 16 | 59,942 | 59,557 | 1600 |
| <i>n</i> -heptadekan | 17 | 65,528 | 65,163 | 1700 |
| <i>n</i> -oktadekan | 18 | 70,836 | 70,482 | 1800 |
| <i>n</i> -nonadekan | 19 | 75,895 | 75,552 | 1900 |
| <i>n</i> -ikosan | 20 | 80,720 | 80,389 | 2000 |
| <i>n</i> -henkosan | 21 | 85,333 | 85,020 | 2100 |
| <i>n</i> -dokosan | 22 | 89,752 | 89,448 | 2200 |
| <i>n</i> -trikosan | 23 | 93,990 | 93,697 | 2300 |
| <i>n</i> -tetrakosan | 24 | 98,050 | 97,785 | 2400 |
| <i>n</i> -pentakosan | 25 | 101,962 | 101,710 | 2500 |
| <i>n</i> -hexakosan | 26 | 105,728 | 105,496 | 2600 |
| <i>n</i> -heptakosan | 27 | 109,421 | 109,190 | 2700 |
| <i>n</i> -oktakosan | 28 | 113,738 | 113,468 | 2800 |
| <i>n</i> -nonakosan | 29 | 119,121 | 118,827 | 2900 |

2.4.2 Vyhodnocení dat pro statistické rozlišení destilátů

Pro druhou část experimentu, tedy rozlišení ovocných destilátů na základě statistické analýzy profilu těkavých látek, byla použita pouze analýza GC-FID. Za stejných podmínek byla

naměřena i homologická řada n -alkanů. Chromatografické měření bylo provedeno jednou. Všechny píky z chromatogramu byly zintegrovány, čímž byly získány retenční časy a plochy píků jednotlivých látek. Retenční časy látek s využitím van Den Doolova vztahu (4) byly převedeny na retenční indexy. Podkladem pro statistickou analýzu chromatografických dat byly retenční indexy a plochy píků související se semikvantitativním zastoupením jednotlivých látek v ovocném destilátu.

Statistické vyhodnocení bylo provedeno v programu SIMCA 13.0 (Sartorius Stedim Data Analytics AB, Umeå, Sweden). Pro vyhodnocení dat byla použita metoda ortogonální projekce do latentních struktur (OPLS) a taktéž metoda hierarchické analýzy shluků.

OPLS model byl vytvořen statistickým zpracováním dat ze 47 vzorků (analyzováno bylo celkem 52 vzorků destilátů z jablek, hrušek, meruněk, švestek a slivoní mirabelek, z nichž 5 vzorků bylo náhodně vyjmuto a pokládáno za neznámé vzorky). Správnost navrženého OPLS modelu byla ověřena vytvořením predikčního souboru dat. Za neznámé vzorky bylo považováno 5 náhodně vyjmutých vzorků a také 11 vzorků netradičních destilátů. Model tedy pracoval se 47 vzorky definovaného ovocného původu a 16 neznámými vzorky (tabulka 1). Výsledky byly graficky zpracovány do závislostí pozorovaných (aktuálních) hodnot LLR (logaritmus pravděpodobnostního poměru) na hodnotách LLR vypočtených (predikovaných) finálním OPLS modelem. Výpočet hodnot LLR byl proveden podle rovnice (6). Aktuální hodnoty LLR jsou teoreticky rovny $-\infty$ nebo $+\infty$, avšak pro praktické vyhodnocení byly zvoleny kladné či záporné číselné hodnoty.

$$\text{LLR} = \ln \left(\frac{\text{pravděpodobnost, že se jedná o daný druh destilátu}}{\text{pravděpodobnost, že se nejedná o daný druh destilátu}} \right) \quad (6)$$

Ilustrativní výpočet aktuální hodnoty LLR, pro oba případy, že se jedná či nejedná o hruškový destilát je uveden v rovnici (7). Kladná hodnota LLR poukazuje na to, že se jedná o hruškový destilát podle skutečnosti, záporná hodnota LLR znamená, že se nejedná o hruškový destilát.

$$\text{HRU_LLR} = \ln \left(\frac{\text{pravděpodobnost, že se jedná o hruškovici}}{\text{pravděpodobnost, že se nejedná o hruškovici}} \right)$$

$$\text{HRU_LLR} = \ln \left(\frac{0,999999}{0,000001} \right) = 13,816 \quad \text{nebo} \quad \text{HRU_LLR} = \ln \left(\frac{0,000000001}{0,999999999} \right) = -20,723 \quad (7)$$

Pro grafické rozlišení a rozřazení jednotlivých ovocných vzorků destilátů byla použita také hierarchická analýza shluků. Pro výpočet meziobjektové, resp. mezishlukové matice vzdáleností byla použita Wardova metoda.

3 VÝSLEDKY A DISKUZE

V této části diplomové práce jsou popsány výsledky experimentálního výzkumu, zaměřeného na analýzu těkavých látek v ovocných destilátech pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí. Jsou zde interpretovány aromaprofilu těkavých látek v netradičních druzích destilátů a diskutovány jejich vzájemné rozdíly, či jejich rozdíly v porovnání s dostupnou literaturou. Dále jsou zde interpretovány výsledky ze statistického rozlišení jednodruhových ovocných destilátů, na základě predikce jejich ovocného druhu s následným ověřením správnosti navrženého statistického modelu.

3.1 Analýza aromaprofilu těkavých látek ve speciálních druzích destilátů

Cílem bylo analyzovat profil a zjistit zastoupení těkavých látek v aroma destilátů ze speciálních druhů ovoce a rostlin či jejich plodů. Analyzováno bylo celkem 11 vzorků, a to konkrétně destilátů z ořechu, mandle, dýně, maliny, pampelišky, žita, květu černého bezu, bezinky, višně a vinné révy. Očekávaným výsledkem bylo zmapování profilu těkavých látek, zjištění podobnosti jednotlivých destilátů a taktéž identifikace majoritních látek aromaprofilu, jež jsou typické právě pro daný druh suroviny. Izolace těkavých látek byla provedena pomocí HS-SPME. Těkavé látky byly poté identifikovány pomocí GC-MS analýzy a jejich zastoupení kvantifikováno pomocí GC-FID. Data ze všech GC-FID (retenční indexy, plochy píků) měření byla zprůměrována a přiřazena s použitím RI k hmotnostním datům z GC-MS. Ve všech vzorcích bylo identifikováno celkem 197 látek. V tabulce 3 jsou uvedeny počty identifikovaných látek v jednotlivých aromaprofilech spolu s relativním zastoupením, jednotlivé sloučeniny jsou dále zařazeny do kategorií podle funkčních skupin látek a podle struktury. Semikvantitativní údaj relativního zastoupení látky odpovídá ploše píku dané látky vztažené na celkovou plochu všech píků v chromatogramu. Do výpočtu byly zahrnuty pouze píky s výškou minimálně desetinásobku výšky šumu. Vždy se jedná o relativní zastoupení dané látky v aromaprofilu (souboru těkavých sloučenin), který byl získán výše popsanou metodou HS-SPME (kapitola 2.2) a analyzován metodou GC-FID (kapitola 2.3). V dalším textu bude používán výraz „rel.%“. Číselný údaj v závorce v tabulce 3 udává počet identifikovaných látek z každé skupiny, jež se podílí na celkovém relativním zastoupení skupiny sloučenin v aromaprofilu daného destilátu. Posledním číselným údajem, jenž se nachází v tabulce 3, je počet identifikovaných látek z celkového počtu všech píků v chromatogramu.

Tabulka 4 souhrnně uvádí jednotlivé identifikované látky a jejich relativní zastoupení v aromaprofilech všech vzorků speciálních destilátů. K průměrné hodnotě relativního zastoupení ze všech měření je uvedena výběrová směrodatná odchylka. Ke každé sloučenině je navíc uveden retenční index vypočtený z GC-FID analýzy a registrační CAS číslo. Jedná se o mezinárodně uznávaný číselný kód, zavedený službou Chemical Abstract Service (CAS), který je jedinečným identifikátorem každé chemické sloučeniny. CAS číslo slouží k identifikaci sloučenin popsanych v databázích literatury, patentů a jiných publikací. Hodnoty retenčních indexů, uvedené v tabulce 4, jsou vypočteny s využitím van Den Doolova vztahu (kapitola 1.6.1) z retenčních časů látek a homologické řady *n*-alkanů, které byly získány z GC-FID měření. Proškrtnuté pole s označením „-“, znamenají, že dané sloučeniny v aromaprofilu vzorku nebyly identifikovány. Pole s označením „stopy“, označují stopové množství dané látky v aromaprofilu. Relativní zastoupení takto označených látek nepřesahovalo hodnotu 0,01 rel. %.

Tabulka 3: Celkové zastoupení jednotlivých skupin látek v aromaprofilech různých druhů destilátů (skupiny látek označené symbolem „-“, nebyly v daném vzorku identifikovány; celkové relativní zastoupení skupin sloučenin se symbolem „stopy“ označuje hodnotu ≤ 0,01 rel. %).

| Druh destilátu | Celkové relativní zastoupení skupin látek [rel. %] | | | | | | | | |
|----------------|--|-----------|----------|-------------------|--------------------|--------------------|------------|------------------|--------------------|
| | ACETALY | KYSELINY | ALKOHOLY | ALDEHYDY A KETONY | ALIFAT. UHLOVODÍKY | AROMAT. UHLOVODÍKY | ESTERY | MONOTERP. ESTERY | SESKVITERP. ESTERY |
| Ořech | 16,85 (3) | 0,09 (2) | 0,86 (6) | 0,33 (5) | 1,13 (1) | - | 56,59 (50) | 0,06 (1) | - |
| Bezinky | 0,09 (1) | 7,82 (2) | 1,21 (3) | 0,09 (1) | 0,89 (4) | 6,97 (1) | 48,77 (20) | - | - |
| Dýně | - | 19,57 (3) | 0,19 (1) | 0,28 (1) | 0,64 (2) | 6,01 (1) | 37,95 (21) | - | - |
| Malina | - | - | 0,31 (2) | 0,50 (2) | - | 3,51 (1) | 20,96 (17) | - | - |
| Pampeliška | - | 67,59 (5) | 0,34 (1) | 0,34 (1) | - | - | 14,63 (17) | - | - |
| Žito | - | 21,96 (3) | 0,46 (3) | 0,09 (1) | 1,21 (3) | 7,57 (1) | 24,36 (22) | 0,42 (1) | - |
| Černý bez květ | 0,12 (3) | 0,16 (2) | 0,20 (2) | 0,14 (3) | 0,03 (1) | 0,38 (2) | 57,73 (26) | - | - |
| Víšeň 1 | 0,30 (3) | - | 0,02 (1) | 0,93 (2) | - | - | 92,64 (25) | - | - |
| Víšeň 2 | - | 1,33 (3) | - | 0,43 (2) | - | - | 93,74 (33) | - | 0,07 (1) |
| Vinná réva | 3,63 (1) | 0,59 (7) | 0,40 (4) | 0,45 (6) | stopy (1) | 0,04 (1) | 91,63 (59) | - | - |
| Mandle | - | 3,93 (3) | 0,10 (1) | 10,52 (1) | - | - | 77,83 (28) | - | - |

| Druh destilátu | Celkové relativní zastoupení skupin látek [rel. %] | | | | | | | | Počet identif. látek z celk. počtu píků |
|----------------|--|---------------|-----------------------|-------------------------|-------------------|--------------------|----------------|----------|---|
| | MONOTERPENY | SESKVITERPENY | OXIDOVANÉ MONOTERPENY | OXIDOVANÉ SESKVITERPENY | TERPENICKÉ ETHERY | FENOLICKÉ DERIVÁTY | APOKAROTENOIDY | LAKTONY | |
| Ořech | 1,82 (10) | 1,42 (4) | 0,86 (6) | 1,99 (4) | - | 1,62 (5) | 0,16 (1) | 0,09 (1) | 99 z 267 |
| Bezinky | - | - | 0,08 (1) | - | - | 15,79 (1) | 0,16 (2) | - | 36 z 197 |
| Dýně | - | - | - | - | - | 18,16 (2) | - | - | 31 z 205 |
| Malina | - | - | 0,56 (2) | - | - | 42,56 (1) | 0,48 (1) | - | 26 z 184 |
| Pampeliška | 0,04 (1) | - | 7,86 (7) | 0,12 (1) | - | 4,00 (3) | - | 0,18 (1) | 37 z 182 |
| Žito | - | - | 0,27 (2) | - | - | 22,40 (2) | - | - | 38 z 219 |
| Černý bez květ | 32,99 (10) | 0,64 (5) | 1,89 (9) | - | 0,14 (1) | - | - | - | 64 z 270 |
| Víšeň 1 | 0,10 (2) | 0,17 (1) | 0,10 (2) | 1,11 (1) | - | 0,53 (1) | - | 0,31 (1) | 39 z 201 |
| Víšeň 2 | 0,11 (2) | 0,32 (2) | 0,06 (2) | - | 0,04 (1) | 0,35 (2) | - | 0,24 (1) | 49 z 183 |
| Vinná réva | 0,03 (3) | 1,18 (4) | 0,06 (3) | - | - | 0,18 (2) | - | 0,01 (1) | 92 z 253 |
| Mandle | - | - | - | - | - | - | - | - | 33 z 147 |

Tabulka 4: Přehled těkavých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů (sloučeniny označené symbolem „-“, nebyly v daném vzorku identifikovány; relativní zastoupení sloučeniny se symbolem „stopy“ označuje hodnotu $\leq 0,01$ rel. %).

| Relativní zastoupení látek [rel. %] \pm výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | | | | |
|---|------|-------------------------------|------------------|-----------------|------------------|-----------------|------------------|------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Víšeň 1 | Víšeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| ACETALY | | | | | | | | | | | | | |
| 1741-41-9 | 854 | Isobutanal diethylacetal | - | - | - | - | - | - | 0,06 \pm 0,01 | 0,17 \pm 0,01 | - | - | - |
| 3842-03-3 | 951 | Isovaleraldehyd diethylacetal | stopy | 0,09 \pm 0,02 | - | - | - | - | 0,03 \pm 0,00 | 0,07 \pm 0,01 | - | - | - |
| 13442-89-2 | 970 | Acetaldehyd ethylamylacetal | 0,03 \pm 0,00 | - | - | - | - | - | 0,04 \pm 0,00 | 0,06 \pm 0,00 | - | - | - |
| 54815-13-3 | 1382 | Nonanal diethylacetal | 16,81 \pm 0,24 | - | - | - | - | - | - | - | - | 3,63 \pm 0,19 | - |
| KYSELINY | | | | | | | | | | | | | |
| 503-74-2 | 840 | Kyselina isovalerová | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 142-62-1 | 983 | Kyselina kapronová | - | - | - | - | 0,12 \pm 0,00 | - | - | - | - | 0,02 \pm 0,00 | - |
| 124-07-2 | 1176 | Kyselina kaprylová | - | 0,72 \pm 0,01 | 1,22 \pm 0,09 | - | 6,98 \pm 0,00 | 2,44 \pm 0,14 | - | - | 0,10 \pm 0,03 | 0,22 \pm 0,31 | 0,52 \pm 0,74 |
| 112-05-0 | 1274 | Kyselina pelargonová | - | - | - | - | 1,36 \pm 0,00 | - | - | - | - | 0,11 \pm 0,01 | - |
| 334-48-5 | 1373 | Kyselina kaprinová | - | 7,10 \pm 0,20 | 15,11 \pm 0,20 | - | 57,09 \pm 0,00 | 16,31 \pm 0,06 | 0,15 \pm 0,01 | - | 0,61 \pm 0,86 | stopy | 3,16 \pm 4,47 |
| 143-07-7 | 1566 | Kyselina laurová | - | - | 3,24 \pm 0,60 | - | 2,04 \pm 0,00 | 3,21 \pm 1,15 | - | - | 0,62 \pm 0,04 | 0,23 \pm 0,01 | 0,25 \pm 0,35 |
| 60-33-3 | 2158 | Kyselina linolová | 0,05 \pm 0,03 | - | - | - | - | - | 0,02 \pm 0,00 | - | - | stopy | - |
| 463-40-1 | 2164 | Kyselina linolenová | 0,04 \pm 0,02 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| ALKOHOLY | | | | | | | | | | | | | |
| 111-27-3 | 873 | 1-Hexanol | 0,35 \pm 0,04 | 0,72 \pm 0,01 | - | 0,08 \pm 0,00 | - | 0,07 \pm 0,01 | - | - | - | 0,05 \pm 0,00 | - |
| 111-87-5 | 1074 | <i>n</i> -Oktanol | 0,04 \pm 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 628-99-9 | 1103 | 2-Nonanol | - | - | - | - | - | 0,16 \pm 0,01 | - | - | - | - | - |
| 60-12-8 | 1112 | 2-Fenylethanol | 0,04 \pm 0,01 | 0,20 \pm 0,02 | 0,19 \pm 0,02 | 0,23 \pm 0,00 | 0,34 \pm 0,00 | 0,23 \pm 0,02 | 0,05 \pm 0,00 | 0,02 \pm 0,00 | - | 0,03 \pm 0,00 | 0,10 \pm 0,01 |
| 143-08-8 | 1173 | <i>n</i> -Nonanol | 0,27 \pm 0,06 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,24 \pm 0,02 | - |
| 112-30-1 | 1276 | <i>n</i> -Dekanol | 0,13 \pm 0,04 | - | - | - | - | - | 0,15 \pm 0,02 | - | - | 0,09 \pm 0,00 | - |
| 112-53-8 | 1476 | Dodekanol | 0,03 \pm 0,03 | 0,29 \pm 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |

Tabulka 4 (pokračování): Přehled těkavých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů.

| | | | Relativní zastoupení látek [rel. %] ± výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | |
|------------------------------|------|----------------------------------|---|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------|-------------|-------------|-------------|--------------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Višeň 1 | Višeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| ALDEHYDY A KETONY | | | | | | | | | | | | | |
| 111-71-7 | 903 | <i>n</i> -Heptanal | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 100-52-7 | 959 | Benzaldehyd | 0,12 ± 0,01 | 0,09 ± 0,00 | - | 0,26 ± 0,00 | - | 0,09 ± 0,01 | - | 0,78 ± 0,14 | 0,35 ± 0,01 | stopy | 10,52 ± 1,52 |
| 124-13-0 | 1004 | <i>n</i> -Oktanal | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 124-19-6 | 1104 | Nonanal | stopy | - | - | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | - | - | 0,41 ± 0,01 | - |
| 18829-56-6 | 1160 | (<i>E</i>)-2-Nonenal | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 112-31-2 | 1205 | <i>n</i> -Dekanal | - | - | - | - | - | - | 0,05 ± 0,00 | - | - | - | - |
| 14371-10-9 | 1271 | (<i>E</i>)-Cinnamaldehyd | 0,14 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | 0,15 ± 0,01 | 0,07 ± 0,00 | - | - |
| 693-54-9 | 1292 | 2-Dekanon | 0,04 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 112-54-9 | 1409 | Dodekanal | 0,02 ± 0,01 | - | - | - | - | - | 0,07 ± 0,00 | - | - | - | - |
| 2460-77-7 | 1458 | <i>p</i> -Benzochinon | - | - | 0,28 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 124-25-4 | 1613 | Tetradekanal | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 119-61-9 | 1624 | Benzofenon | - | - | - | 0,24 ± 0,02 | 0,34 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - |
| ALIFATICKÉ UHLOVODÍKY | | | | | | | | | | | | | |
| 19549-87-2 | 836 | 2,4-Dimethyl-1-hepten | - | 0,47 ± 0,03 | 0,48 ± 0,07 | - | - | 0,90 ± 0,01 | - | - | - | - | - |
| 112-40-3 | 1200 | <i>n</i> -Dodekan | - | 0,11 ± 0,00 | - | - | - | 0,13 ± 0,00 | - | - | - | - | - |
| 629-59-4 | 1402 | <i>n</i> -Tetradekan | - | 0,15 ± 0,04 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 629-62-9 | 1500 | <i>n</i> -Pentadekan | 1,13 ± 0,19 | 0,16 ± 0,05 | 0,16 ± 0,05 | - | - | 0,18 ± 0,05 | - | - | - | - | - |
| 544-76-3 | 1601 | <i>n</i> -Hexadekan | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 629-92-5 | 1900 | <i>n</i> -Nonadekan | - | - | - | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | - | - | - | - |
| AROMATICKÉ UHLOVODÍKY | | | | | | | | | | | | | |
| 108-88-3 | 784 | Toluen | - | - | - | - | - | - | 0,29 ± 0,03 | - | - | - | - |
| 100-42-5 | 888 | Vinylbenzen | - | - | - | - | - | - | 0,09 ± 0,01 | - | - | 0,04 ± 0,00 | - |
| 1014-60-4 | 1246 | 1,3-Di- <i>tert</i> -butylbenzen | - | 6,97 ± 0,56 | 6,01 ± 0,27 | 3,51 ± 0,10 | - | 7,57 ± 0,64 | - | - | - | - | - |

Tabulka 4 (pokračování): Přehled těkavých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů.

| | | | Relativní zastoupení látek [rel. %] ± výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | |
|---------------|------|-----------------------------------|---|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Višeň 1 | Višeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| ESTERY | | | | | | | | | | | | | |
| 97-62-1 | 781 | Ethyl isobutyrát | 0,13 ± 0,02 | - | 0,07 ± 0,01 | - | - | 0,05 ± 0,00 | - | - | 0,03 ± 0,00 | 0,03 ± 0,00 | 0,21 ± 0,02 |
| 110-19-0 | 788 | Isobutyl acetát | 0,06 ± 0,01 | 0,06 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 868-57-5 | 789 | Methyl 2-methyl butanoát | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,05 ± 0,00 | - | - |
| 105-54-4 | 803 | Ethyl butyrát | 0,07 ± 0,01 | 0,08 ± 0,01 | 0,11 ± 0,01 | 0,09 ± 0,00 | - | 0,10 ± 0,01 | 0,02 ± 0,00 | 0,04 ± 0,01 | 0,04 ± 0,00 | 0,05 ± 0,00 | 0,45 ± 0,09 |
| 97-64-3 | 815 | Ethyl laktát | stopy | 0,32 ± 0,05 | 0,44 ± 0,04 | 0,02 ± 0,03 | 0,53 ± 0,00 | 0,23 ± 0,08 | - | - | - | stopy | 0,17 ± 0,01 |
| 623-70-1 | 843 | Ethyl (<i>E</i>)-krotonát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 7452-79-1 | 847 | Ethyl 2-methylbutyrát | 0,07 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | 0,03 ± 0,01 |
| 108-64-5 | 851 | Ethyl isovalerát | 0,33 ± 0,07 | 0,11 ± 0,00 | 0,12 ± 0,01 | - | - | 0,12 ± 0,01 | - | - | - | 0,07 ± 0,00 | 0,06 ± 0,01 |
| 123-92-2 | 875 | Isoamyl acetát | 0,64 ± 0,13 | 0,18 ± 0,00 | 0,06 ± 0,02 | 1,79 ± 0,02 | - | 0,63 ± 0,01 | 0,36 ± 0,04 | 0,28 ± 0,00 | 1,09 ± 0,07 | 0,16 ± 0,01 | 1,40 ± 0,28 |
| 624-41-9 | 878 | 2-methylbutyl acetát | 0,17 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | - | 0,36 ± 0,02 | - | - |
| 106-70-7 | 924 | Methyl kapronát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 123-66-0 | 999 | Ethyl kapronát | 1,26 ± 0,35 | 0,92 ± 0,11 | 0,73 ± 0,05 | 1,94 ± 0,04 | - | 1,22 ± 0,10 | 0,67 ± 0,05 | 0,22 ± 0,01 | 0,17 ± 0,01 | 1,00 ± 0,03 | 5,02 ± 1,10 |
| 3681-71-8 | 1005 | Hex-(3 <i>Z</i>)-enyl acetát | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,24 ± 0,01 | - | - |
| 142-92-7 | 1013 | Hexyl acetát | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,96 ± 0,06 | stopy | - |
| 15706-73-7 | 1041 | Butyl 2-methylbutanoát | stopy | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 27829-72-7 | 1045 | Ethyl (<i>E</i>)-2-hexenoát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 614-99-3 | 1051 | Ethyl furoát | stopy | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 10348-47-7 | 1056 | Ethyl 2-hydroxy-4-methylpentanoát | - | - | - | - | 0,13 ± 0,00 | 0,09 ± 0,02 | - | - | - | - | 0,06 ± 0,00 |
| 19329-89-6 | 1070 | Isoamyl laktát | - | - | 0,56 ± 0,05 | - | 0,06 ± 0,00 | 0,05 ± 0,03 | - | - | - | - | - |
| 106-30-9 | 1098 | Ethyl heptanoát | 0,05 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | - |
| 27625-35-0 | 1104 | Isopentyl 2-methylbutanoát | 0,15 ± 0,02 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 111-11-5 | 1124 | Methyl kaprylát | 0,04 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,04 ± 0,00 | - |
| 105-79-3 | 1150 | Isobutyl kapronát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |

Tabulka 4 (pokračování): Přehled těžkých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů.

| | | | Relativní zastoupení látek [rel. %] ± výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | |
|---------------|------|---------------------------------|---|-------------|-------------|-------------|--------------|-------------|----------------|-------------|-------------|--------------|--------------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Víšeň 1 | Víšeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| ESTERY | | | | | | | | | | | | | |
| 140-11-4 | 1161 | Benzyl acetát | - | - | - | 0,14 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | - |
| 93-89-0 | 1168 | Ethyl benzoát | 0,28 ± 0,04 | - | - | 0,20 ± 0,01 | - | 0,07 ± 0,01 | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | - |
| 123-25-1 | 1180 | Diethyl sukcinát | - | 0,11 ± 0,00 | 0,39 ± 0,02 | 0,18 ± 0,00 | 11,35 ± 0,00 | 0,33 ± 0,02 | - | - | 0,04 ± 0,00 | - | 0,57 ± 0,10 |
| 119-36-8 | 1190 | Methyl salicylát | - | 0,08 ± 0,02 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 78989-37-4 | 1190 | Ethyl (<i>E</i>)-4-oktenoát | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 2639-63-6 | 1191 | Hexyl butanoát | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 106-32-1 | 1196 | Ethyl kaprylát | 12,04 ± 3,11 | 8,27 ± 1,12 | 5,82 ± 0,22 | 4,12 ± 0,09 | 0,09 ± 0,00 | 4,83 ± 0,69 | 6,60 ± 0,09 | 4,57 ± 0,23 | 5,07 ± 0,11 | 17,66 ± 0,08 | 28,44 ± 4,60 |
| 10032-15-2 | 1235 | Hexyl 2-methylbutyrát | 0,39 ± 0,08 | - | - | - | - | - | 0,04 ± 0,01 | - | - | 0,11 ± 0,00 | - |
| 101-97-3 | 1241 | Ethyl fenylacetát | 0,04 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | 0,06 ± 0,01 |
| 19089-92-0 | 1242 | Hexyl krotonát | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 2198-61-0 | 1249 | Isoamyl kapronát | 0,28 ± 0,04 | - | - | - | - | - | 0,07 ± 0,00 | 0,04 ± 0,00 | 0,02 ± 0,00 | 0,07 ± 0,00 | 0,10 ± 0,01 |
| 103-45-7 | 1253 | Fenethyl acetát | - | 0,23 ± 0,01 | 0,48 ± 0,00 | 0,70 ± 0,01 | 0,32 ± 0,00 | 0,37 ± 0,03 | - | 0,06 ± 0,01 | 0,06 ± 0,00 | 0,07 ± 0,00 | 0,11 ± 0,01 |
| 118-61-6 | 1266 | Ethyl salicylát | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 540-07-8 | 1287 | Amyl kapronát | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,23 ± 0,00 | - | - |
| 91213-30-8 | 1289 | Ethyl (<i>3E</i>)-3-nonenoát | 0,04 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | - |
| 624-13-5 | 1291 | Propyl oktanoát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,04 ± 0,00 | - |
| 123-29-5 | 1295 | Ethyl pelargonát | 0,96 ± 0,13 | 0,15 ± 0,01 | 0,16 ± 0,02 | - | - | 0,15 ± 0,02 | 0,14 ± 0,00 | 0,02 ± 0,00 | 0,02 ± 0,00 | 0,87 ± 0,01 | 0,06 ± 0,03 |
| 143-13-5 | 1310 | Pelargonyl acetát | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,06 ± 0,00 | - |
| 110-42-9 | 1323 | Methyl kaprinát | 0,17 ± 0,02 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,20 ± 0,00 | - |
| 2021-28-5 | 1346 | Ethyl hydrocinnamát | - | - | 0,10 ± 0,01 | - | - | 0,21 ± 0,01 | - | - | - | - | - |
| 5461-06-3 | 1347 | Isobutyl kaprylát | 0,27 ± 0,02 | - | - | - | - | - | 0,06 ± 0,00 | 0,05 ± 0,00 | 0,11 ± 0,00 | 0,07 ± 0,00 | 0,21 ± 0,03 |
| 150-84-5 | 1349 | Citronellol acetát | - | - | - | - | - | - | 0,18 ± 0,01 | - | - | - | - |
| 31501-11-8 | 1377 | (<i>Z</i>)-3-Hexenyl kapronát | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,99 ± 1,31 | - | - |

Tabulka 4 (pokračování): Přehled těkavých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů.

| | | | Relativní zastoupení látek [rel. %] ± výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | |
|---------------|------|--------------------------------------|---|--------------|--------------|-------------|-------------|-------------|----------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Višeň 1 | Višeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| ESTERY | | | | | | | | | | | | | |
| 67233-91-4 | 1386 | Ethyl 9-dekenoát | - | 0,36 ± 0,06 | - | - | - | 0,48 ± 0,19 | 0,38 ± 0,00 | 0,13 ± 0,00 | - | 1,84 ± 0,25 | 0,43 ± 0,01 |
| 76649-16-6 | 1386 | Ethyl (<i>E</i>)-4-dekenoát | 0,40 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 110-38-3 | 1396 | Ethyl kaprinát | 16,93 ± 0,14 | 29,16 ± 0,62 | 21,94 ± 0,88 | 6,43 ± 0,27 | 0,17 ± 0,00 | 9,49 ± 1,26 | 26,49 ± 1,11 | 62,10 ± 0,76 | 55,81 ± 0,07 | 56,73 ± 0,13 | 27,92 ± 0,41 |
| 93-15-2 | 1400 | Methyleugenol | 0,12 ± 0,04 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 112-17-4 | 1410 | Decyl acetát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | - |
| 28024-16-0 | 1427 | Ethyl isopentyl succinát | - | 0,19 ± 0,04 | 0,31 ± 0,02 | - | 0,67 ± 0,00 | 0,21 ± 0,00 | - | - | 0,05 ± 0,00 | - | 0,25 ± 0,02 |
| 94-46-2 | 1438 | Isoamyl benzoát | 0,03 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | - |
| 21040-45-9 | 1443 | (<i>E</i>)-Cinnamyl acetát | 0,50 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | 0,11 ± 0,01 | 0,07 ± 0,00 | - | - |
| 2035-99-6 | 1447 | 3-Methylbutyl oktanoát | 0,15 ± 0,01 | 0,35 ± 0,00 | 0,05 ± 0,07 | - | - | - | 1,64 ± 0,15 | 0,82 ± 0,00 | 0,62 ± 0,01 | 0,75 ± 0,01 | 0,60 ± 0,00 |
| 67121-39-5 | 1448 | 2-Methylbutyl oktanoát | - | - | - | - | - | - | 0,26 ± 0,02 | 0,19 ± 0,00 | 0,17 ± 0,00 | 0,15 ± 0,00 | 0,14 ± 0,00 |
| 4192-77-2 | 1465 | (<i>E</i>)-Ethyl cinnamát | 0,08 ± 0,01 | - | - | 0,34 ± 0,00 | 0,38 ± 0,00 | - | - | - | - | 0,07 ± 0,00 | - |
| 3025-30-7 | 1469 | Ethyl (<i>E,Z</i>)-2,4-dekadienoát | 0,89 ± 0,08 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,40 ± 0,01 | - |
| 24817-51-4 | 1483 | Fenethyl 2-methylbutyrát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 102-19-2 | 1486 | Isopentyl fenylacetát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 30673-60-0 | 1490 | Propyl dekanóát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,14 ± 0,00 | - |
| 627-90-7 | 1494 | Ethyl undekanoát | 0,14 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | 0,05 ± 0,00 | - |
| 23676-09-7 | 1521 | Ethyl 4-ethoxybenzoát | - | - | - | - | 0,09 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - |
| 111-82-0 | 1523 | Methyl laurát | 0,32 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,10 ± 0,00 | - |
| 30673-38-2 | 1545 | Isobutyl kaprinát | - | - | - | - | - | - | - | 0,31 ± 0,00 | 0,41 ± 0,01 | 0,08 ± 0,00 | 0,13 ± 0,01 |
| 6789-88-4 | 1577 | Hexyl benzoát | 0,09 ± 0,02 | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | - |
| 1117-55-1 | 1581 | Hexyl oktanoát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,05 ± 0,01 | - |
| 106-33-2 | 1594 | Ethyl laurát | 16,04 ± 2,02 | 7,17 ± 1,14 | 5,43 ± 0,01 | 2,05 ± 0,23 | 0,11 ± 0,00 | 3,40 ± 0,03 | 12,88 ± 1,37 | 18,51 ± 0,57 | 24,10 ± 0,01 | 9,77 ± 0,01 | 7,96 ± 1,25 |
| 112-66-3 | 1608 | Lauryl acetát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 6290-37-5 | 1639 | Fenylethyl kapronát | 0,86 ± 0,04 | 0,10 ± 0,02 | 0,14 ± 0,06 | - | - | 0,73 ± 0,01 | 0,74 ± 0,01 | 0,14 ± 0,00 | 0,09 ± 0,00 | 0,12 ± 0,00 | 0,09 ± 0,00 |

Tabulka 4 (pokračování): Přehled těkavých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů.

| | | | Relativní zastoupení látek [rel. %] ± výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | |
|---------------|------|------------------------------|---|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Višeň 1 | Višeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| ESTERY | | | | | | | | | | | | | |
| 2306-91-4 | 1644 | 3-Methylbutyl dekanoát | 0,62 ± 0,04 | - | - | - | - | - | 4,23 ± 0,40 | 2,51 ± 0,10 | 1,56 ± 0,02 | 0,20 ± 0,00 | 0,45 ± 0,07 |
| 68067-33-4 | 1647 | 2-Methylbutyl dekanoát | - | - | - | - | - | - | 0,62 ± 0,05 | 0,53 ± 0,02 | 0,42 ± 0,01 | 0,05 ± 0,00 | - |
| 624-17-9 | 1684 | Diethyl azelát | - | - | - | - | 0,19 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - |
| 3681-78-5 | 1689 | Propyl laurát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 28267-29-0 | 1693 | Ethyl tridekanoát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 10287-53-3 | 1703 | Ethyl p-dimethylaminobenzoát | - | - | - | - | 0,19 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - |
| 124-10-7 | 1724 | Methyl myristát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 37811-72-6 | 1744 | Isobutyl laurát | 0,03 ± 0,00 | - | - | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | - | 0,04 ± 0,00 | stopy | - |
| 120-51-4 | 1764 | Benzyl benzoát | - | - | - | - | - | - | - | 0,12 ± 0,00 | 0,06 ± 0,00 | - | - |
| 2306-88-9 | 1776 | n-Oktyl kaprylát | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - |
| 10448-26-7 | 1779 | Hexyl kaprinát | 0,07 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 124-06-1 | 1793 | Ethyl myristát | 0,84 ± 0,11 | 0,34 ± 0,06 | 0,42 ± 0,01 | 0,32 ± 0,03 | - | 0,13 ± 0,18 | 0,26 ± 0,01 | 1,01 ± 0,00 | 0,56 ± 0,04 | 0,18 ± 0,01 | 0,36 ± 0,10 |
| 110-27-0 | 1824 | Isopropyl myristát | - | - | - | 0,23 ± 0,05 | - | - | - | - | - | - | - |
| 6309-51-9 | 1843 | Isoamyl laurát | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,09 ± 0,01 | - | - |
| 5457-70-5 | 1843 | Fenylethyl oktanoát | 0,38 ± 0,06 | 0,09 ± 0,01 | 0,15 ± 0,02 | 0,29 ± 0,03 | - | 1,14 ± 0,18 | 1,58 ± 0,14 | 0,29 ± 0,00 | - | 0,06 ± 0,00 | 0,15 ± 0,06 |
| 93815-53-3 | 1846 | 2-Methylbutyl laurát | - | - | - | - | - | - | 0,04 ± 0,05 | 0,03 ± 0,00 | 0,02 ± 0,00 | - | - |
| 84-69-5 | 1856 | Diisobutyl ftalát | - | - | 0,06 ± 0,00 | 0,77 ± 0,05 | 0,24 ± 0,00 | - | stopy | - | - | - | - |
| 41114-00-5 | 1893 | Ethyl pentadekanoát | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 72934-05-5 | 1910 | Citronellol kaprylát | - | - | - | - | - | - | 0,05 ± 0,00 | - | - | - | - |
| 112-39-0 | 1925 | Methyl palmitát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 84-74-2 | 1952 | Dibutyl ftalát | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | 0,04 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - |
| 54546-22-4 | 1970 | Ethyl (E)-9-hexadekenoát | 0,04 ± 0,01 | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | - | 0,14 ± 0,01 | - | - | stopy | 1,86 ± 0,16 |
| 628-97-7 | 1993 | Ethyl palmitát | 0,46 ± 0,17 | 0,50 ± 0,03 | 0,44 ± 0,02 | 1,34 ± 0,07 | 0,05 ± 0,00 | 0,35 ± 0,07 | 0,22 ± 0,02 | 0,28 ± 0,01 | 0,18 ± 0,02 | 0,07 ± 0,01 | 0,55 ± 0,07 |
| 111-62-6 | 2166 | Ethyl oleát | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - | - | - |

Tabulka 4 (pokračování): Přehled těžkých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů.

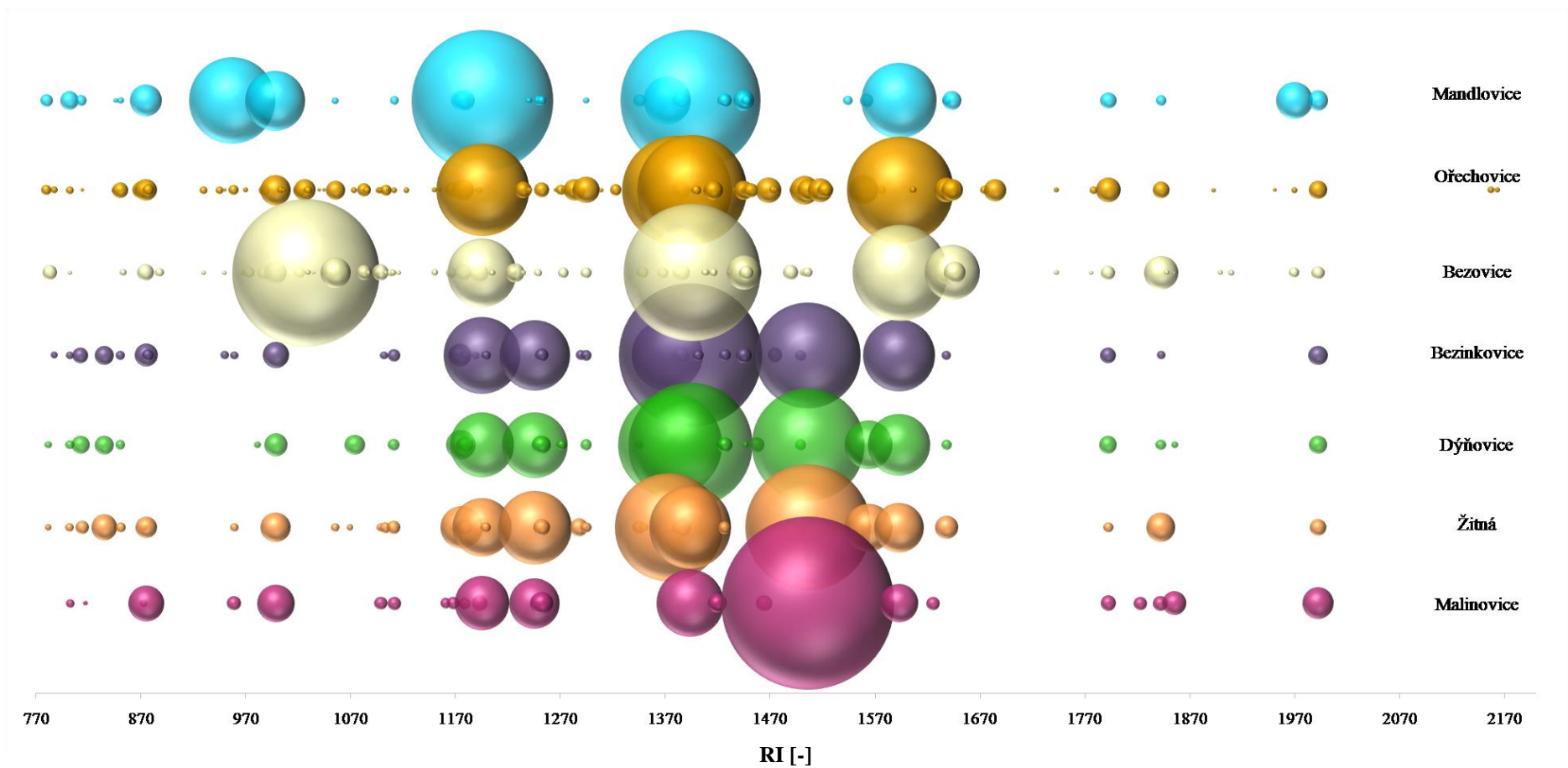
| | | | Relativní zastoupení látek [rel. %] ± výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | |
|--------------------------------|------|------------------------------------|---|---------|------|--------|-------------|-------------|----------------|-------------|-------------|------------|--------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Višeň 1 | Višeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| MONOTERPENICKÉ ESTERY | | | | | | | | | | | | | |
| 16409-45-3 | 1288 | Mentyl acetát | - | - | - | - | - | 0,42 ± 0,06 | - | - | - | - | - |
| 80-26-2 | 1347 | α -Terpinyl acetát | 0,06 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| SESKVITERPENICKÉ ESTERY | | | | | | | | | | | | | |
| 58130-58-8 | 1800 | 2,3-Dihydrofarnesyl acetát | - | - | - | - | - | - | - | 0,26 ± 0,00 | 0,07 ± 0,01 | - | - |
| MONOTERPENY | | | | | | | | | | | | | |
| 80-56-8 | 930 | α -Pinen | 0,08 ± 0,01 | - | - | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | - | - | - | - |
| 79-92-5 | 946 | Kamfen | 0,07 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 127-91-3 | 974 | β -Pinen | - | - | - | - | - | - | 0,18 ± 0,01 | - | - | - | - |
| 123-35-3 | 988 | β -Myrcen | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - | - | 0,26 ± 0,02 | 0,02 ± 0,00 | - | - | - |
| 99-83-2 | 1004 | α -Fellandren | 0,07 ± 0,02 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 13466-78-9 | 1006 | 3-Karen | 0,03 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 527-84-4 | 1022 | <i>o</i> -Cymen | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 99-87-6 | 1022 | <i>p</i> -Cymen | 0,20 ± 0,04 | - | - | - | - | - | 0,17 ± 0,01 | - | stopy | - | - |
| 138-86-3 | 1027 | Limonen | 0,64 ± 0,10 | - | - | - | - | - | 30,77 ± 2,06 | 0,08 ± 0,01 | 0,10 ± 0,00 | stopy | - |
| 3338-55-4 | 1035 | (<i>Z</i>)- β -Ocimen | - | - | - | - | - | - | stopy | - | - | - | - |
| 502-99-8 | 1045 | α -Ocimen | stopy | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 3779-61-1 | 1046 | (<i>E</i>)- β -Ocimen | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - |
| 99-85-4 | 1056 | γ -Terpinen | 0,48 ± 0,08 | - | - | - | - | - | 1,24 ± 0,06 | - | - | - | - |
| 586-62-9 | 1083 | Terpinolen | 0,22 ± 0,03 | - | - | - | 0,04 ± 0,00 | - | 0,28 ± 0,02 | - | - | stopy | - |
| 1195-32-0 | 1088 | <i>p</i> -Cymenen | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - |
| SESKVITERPENY | | | | | | | | | | | | | |
| 118-65-0 | 1417 | (<i>Z</i>)- β -Karyofyllen | - | - | - | - | - | - | - | 0,17 ± 0,00 | 0,12 ± 0,01 | - | - |
| 87-44-5 | 1417 | (<i>E</i>)- β -Karyofyllen | 0,47 ± 0,05 | - | - | - | - | - | 0,08 ± 0,00 | - | - | stopy | - |
| 13474-59-4 | 1432 | (<i>E</i>)- α -Bergamoten | - | - | - | - | - | - | 0,05 ± 0,00 | - | - | - | - |

Tabulka 4 (pokračování): Přehled těkavých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů.

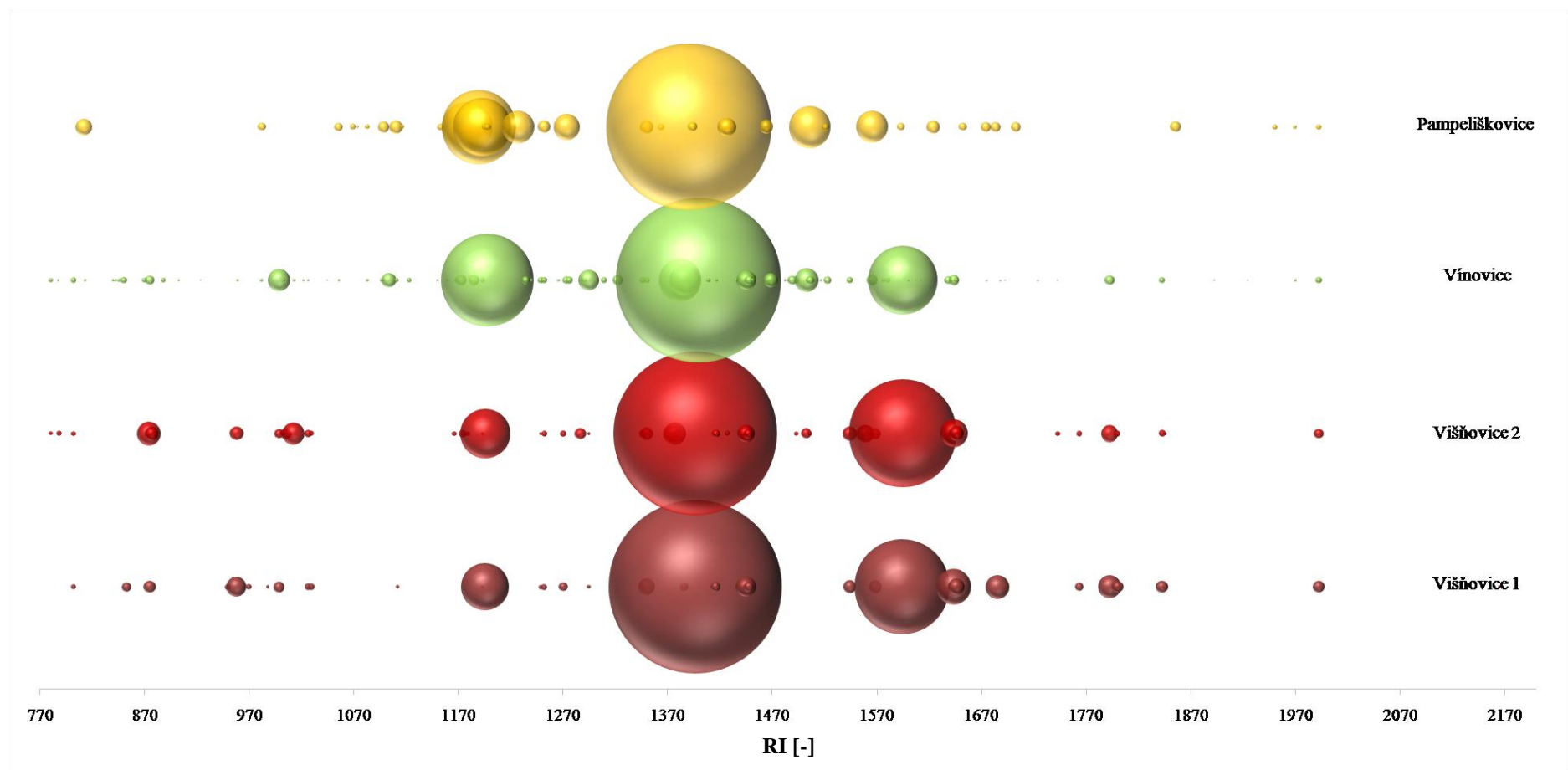
| | | | Relativní zastoupení látek [rel. %] ± výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | |
|--------------------------------|------|------------------------|---|-------------|------|-------------|-------------|-------------|----------------|-------------|-------------|-------------|--------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Višeň 1 | Višeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| SESKVITERPENY | | | | | | | | | | | | | |
| 18794-84-8 | 1452 | (E)-β-Farnesen | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 0,02 ± 0,00 | - |
| 6753-98-6 | 1453 | α-Karyofyllen | 0,26 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 4630-07-3 | 1490 | Valencen | - | - | - | - | - | - | 0,29 ± 0,03 | - | - | - | - |
| 10208-80-7 | 1497 | α-Muurolen | 0,06 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 502-61-4 | 1503 | (E,E)-α-Farnesen | 0,63 ± 0,05 | - | - | - | - | - | 0,09 ± 0,01 | - | 0,21 ± 0,01 | 1,14 ± 0,00 | - |
| 4891-79-6 | 1506 | β-Bisabolen | - | - | - | - | - | - | 0,12 ± 0,01 | - | - | - | - |
| 483-76-1 | 1517 | δ-Kadinen | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| OXIDOVANÉ MONOTERPENY | | | | | | | | | | | | | |
| 7392-19-0 | 968 | Linaloyl oxid | - | - | - | - | - | - | 0,03 ± 0,00 | - | - | - | - |
| 470-82-6 | 1030 | 1,8-Cineol | 0,08 ± 0,02 | - | - | - | - | - | 0,04 ± 0,00 | 0,08 ± 0,00 | 0,05 ± 0,00 | - | - |
| 17699-16-0 | 1056 | trans-Sabinen hydrát | - | - | - | - | - | - | - | - | - | stopy | - |
| 5989-33-3 | 1074 | (Z)-Linalool furanoxid | - | - | - | - | stopy | - | - | - | - | - | - |
| 1195-79-5 | 1086 | Fenchon | 0,07 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 78-70-6 | 1099 | Linalool | 0,05 ± 0,01 | 0,08 ± 0,00 | - | 0,23 ± 0,01 | 0,25 ± 0,00 | 0,09 ± 0,00 | 0,36 ± 0,05 | - | - | 0,02 ± 0,00 | - |
| 16409-43-1 | 1109 | Bois de Rose oxid | - | - | - | - | - | - | 0,07 ± 0,01 | - | - | - | - |
| 1632-73-1 | 1117 | Fenchol | - | - | - | - | 0,04 ± 0,00 | - | 0,03 ± 0,00 | - | - | - | - |
| 1786-08-9 | 1151 | Nerol oxid | - | - | - | - | - | - | 0,05 ± 0,01 | - | - | - | - |
| 5986-38-9 | 1154 | (E)-Ocimenol | - | - | - | - | 0,08 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - |
| 10458-14-7 | 1156 | Menthon | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 562-74-3 | 1178 | 4-Terpineol | 0,60 ± 0,02 | - | - | - | 5,22 ± 0,00 | - | 0,38 ± 0,05 | - | - | - | - |
| 98-55-5 | 1194 | α-Terpineol | 0,05 ± 0,00 | - | - | 0,34 ± 0,00 | 0,08 ± 0,00 | 0,19 ± 0,02 | 0,47 ± 0,07 | 0,02 ± 0,00 | 0,02 ± 0,00 | 0,04 ± 0,00 | - |
| 106-22-9 | 1227 | Citronellol | - | - | - | - | 2,18 ± 0,00 | - | 0,47 ± 0,07 | - | - | - | - |
| OXIDOVANÉ SESKVITERPENY | | | | | | | | | | | | | |
| 107602-52-8 | 1474 | Cabreuva oxid D | 0,08 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |

Tabulka 4 (pokračování): Přehled těkavých sloučenin identifikovaných v aromaprofilech netradičních druhů destilátů.

| | | | Relativní zastoupení látek [rel. %] ± výběrová směrodatná odchylka [rel. %] (n = 3) | | | | | | | | | | |
|--------------------------------|------|-----------------------------------|---|--------------|--------------|--------------|-------------|--------------|----------------|-------------|-------------|-------------|--------|
| CAS číslo | RI | Název sloučeniny | Ořech | Bezinka | Dýně | Malina | Pampeliška | Žito | Černý bez květ | Višeň 1 | Višeň 2 | Vinná réva | Mandle |
| OXIDOVANÉ SESKVITERPENY | | | | | | | | | | | | | |
| 40716-66-3 | 1560 | (<i>E</i>)-Nerolidol | 1,19 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 38142-56-2 | 1607 | β -Atlantol | 0,05 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 26184-88-3 | 1653 | α -Bisabolol oxid B | - | - | - | - | 0,12 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - |
| 21653-33-8 | 1685 | Akorenol B | 0,67 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 27745-36-4 | 1685 | (<i>E</i>)-2,3-Dihydrofarnesol | - | - | - | - | - | - | - | 1,11 ± 0,04 | - | - | - |
| TERPENICKÉ ETHERY | | | | | | | | | | | | | |
| 72845-33-1 | 1167 | Linalool ethyl ether | - | - | - | - | - | - | 0,14 ± 0,00 | - | 0,04 ± 0,00 | - | - |
| FENOLICKÉ DERIVÁTY | | | | | | | | | | | | | |
| 637-69-4 | 1151 | <i>p</i> -Vinylnizol | 0,03 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 2785-89-9 | 1272 | <i>p</i> -Ethylguaiakol | - | - | 0,14 ± 0,02 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 4180-23-8 | 1284 | (<i>E</i>)-Anethol | 0,65 ± 0,13 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 94-59-7 | 1287 | Safrol | 0,13 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 97-53-0 | 1351 | Eugenol | 0,02 ± 0,00 | - | - | - | 0,36 ± 0,00 | 0,08 ± 0,00 | - | 0,53 ± 0,04 | 0,32 ± 0,00 | 0,05 ± 0,00 | - |
| 6380-23-0 | 1364 | 3,4-Dimethoxystyren | - | - | - | - | 0,08 ± 0,00 | - | - | - | - | - | - |
| 96-76-4 | 1507 | 2,4-Di- <i>tert</i> -butylfenol | - | 15,79 ± 0,54 | 18,02 ± 1,29 | 42,56 ± 0,64 | 3,57 ± 0,00 | 22,31 ± 1,01 | - | - | 0,03 ± 0,00 | 0,13 ± 0,00 | - |
| 607-91-0 | 1518 | Myristicin | 0,79 ± 0,04 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| APOKAROTENOIDY | | | | | | | | | | | | | |
| 110-93-0 | 988 | 6-Methyl-5-hepten-2-on | 0,16 ± 0,02 | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 72746-44-2 | 1290 | Dihydroedulan | - | 0,13 ± 0,01 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 23726-93-4 | 1379 | (<i>E</i>)- β -Damascenon | - | 0,03 ± 0,04 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 127-41-3 | 1420 | (<i>E</i>)- α -Ionon | - | - | - | 0,48 ± 0,03 | - | - | - | - | - | - | - |
| LAKTONY | | | | | | | | | | | | | |
| 104-67-6 | 1569 | γ -Undekalaktol | - | - | - | - | - | - | - | 0,31 ± 0,04 | 0,24 ± 0,02 | - | - |
| 2305-05-7 | 1675 | γ -Dodekalaktol | 0,09 ± 0,00 | - | - | - | 0,18 ± 0,00 | - | - | - | - | stopy | - |



Obrázek 7: Aromaprofil těkavých látek zastoupených ve speciálních druzích destilátů, ve formě bublinového grafu (mandlovice, ořechovice, bezovice, bezinkovice, dýňovice, žitná, malinovice).



Obrázek 8: Aromaprofil těkavých látek zastoupených ve speciálních druzích destilátů, ve formě bublinového grafu (pampeliškovice, vínovice, višňovice 1 a 2).

K tabulce 4 se váží bublinové grafy zobrazené na obrázku 7 a 8, pomocí nichž jsou vyobrazeny aromaprofilu těkavých látek v netradičních destilátech, které slouží k názornější představě o jejich složení. Všechny identifikované látky jsou seřazeny vzestupně podle experimentálně zjištěných retenčních indexů z GC-FID měření. Plochy kruhů na obrázcích 7 a 8 odpovídají plochám píků látek vztažených na celkovou plochu chromatogramu, tedy jejich relativnímu zastoupení. Pro ilustraci jsou v přílohách 5 až 9 uvedeny chromatogramy z GC-FID analýzy pro vybrané druhy netradičních destilátů, a to pro bezový destilát (příloha 5), bezinkovici (příloha 6), žitný destilát (příloha 7), pampeliškovici (příloha 8) a malinovici (příloha 9).

3.1.1 Diskuze a porovnání složení vybraných druhů destilátů

V aromaprofilech jedenácti netradičních destilátů bylo celkem identifikováno 197 různých látek. V této kapitole budou diskutovány rozdíly ve složení aromaprofilů analyzovaných destilátů, které jsou zaznamenány v tabulkách 3 a 4, a také na obrázcích 7 a 8. Porovnání těkavých látek v testovaných destilátech z ořechu, bezinky, dýně, maliny, pampelišky, žita, květu černého bezu, višně, vinné révy a mandle bude provedeno vzájemně a také s dostupnou literaturou.

3.1.1.1 Porovnání profilů těkavých látek z hlediska skupin látek

Porovnání složení aromaprofilů destilátů z pohledu druhu identifikovaných látek je uvedeno v tabulce 3. Nejvíce látek bylo identifikováno v ořechové pálenice (99) a destilátu z vinné révy (92). Ve většině pálenek tvoří největší podíl identifikovaných látek estery, a to jak z hlediska relativního zastoupení, tak i počtu sloučenin. Výjimkou je pouze pampeliškovice, ve které největší podíl identifikovaných látek tvoří kyseliny, konkrétně 67,59 rel. %. Vůbec nejvíce esterů bylo identifikováno v pálenice z višně 2, a to 93,74 rel. %. Relativně málo látek bylo identifikováno v destilátech z dýně a maliny, a to pouze 31 a 26 sloučenin. V aromaprofilu malinovice tvoří největší podíl identifikovaných sloučenin estery (20,96 rel. %) a fenolické deriváty (42,56 rel. %), zatímco v aromaprofilu dýňového destilátu byly nejvíce zastoupeny estery (37,95 rel. %) a kyseliny (19,57 rel. %). Vůbec největší podíl kyselin (67,59 rel. %) a nejmenší podíl esterů (14,63 rel. %) ze všech analyzovaných druhů destilátů byl nalezen v aromaprofilu pampeliškovice. Složení obou analyzovaných višňových destilátů je obdobné, z pohledu většiny látek, avšak malý rozdíl je patrný v obsahu acetalů a kyselin. Oba višňové destiláty jsou bohaté na estery, konkrétně 92,64 rel. % a 93,74 rel. %. Při pohledu na tabulku 3 je patrné, že destiláty z květu černého bezu a bezinky se liší hlavně v obsahu monoterpenů. V aromaprofilu destilátu z černého bezu bylo identifikováno 32,99 rel. %

monoterpenů, zatímco v bezinkové pálenice nebyly monoterpeny vůbec identifikovány. Důvodem tohoto rozdílu může být, kromě faktu, že čerstvé květy černého bezu jsou bohaté na monoterpeny (**Bajer a kol.** [128]) i způsob výroby destilátu. Podle informací výrobce bylo při zakládání kvasu použito také malé množství citrusových plodů, konkrétně citronů. Dalším významným rozdílem mezi aromaprofily těchto destilátů je i množství identifikovaných esterů a kyselin. V aromaprofilu destilátu z květu černého bezu bylo identifikováno o 8,96 rel. % více esterů, v porovnání s bezinkovicí, zatímco v aromaprofilu bezinkovice bylo identifikováno 7,82 rel. % kyselin, které se v aromaprofilu bezového destilátu vůbec nenacházeli. Nejvíce zastoupené v aromaprofilu žitné pálenky byly kyseliny (21,96 rel. %), estery (24,36 rel. %) a fenolické deriváty (22,4 rel. %). V aromaprofilu žitné pálenky bylo identifikováno pouze 38 sloučenin, z nichž bylo 22 esterů. V mandlovici byly identifikovány pouze estery (77,83 rel. %), kyseliny (3,93 rel. %), aldehydy a ketony (10,52 rel. %) a alkoholy (0,1 rel. %).

3.1.1.2 Nejvýznamnější sloučeniny z jednotlivých skupin látek

Vzájemná podobnost analyzovaných destilátů vyplývá z aromaprofilů těkavých látek, jež jsou zobrazeny na obrázcích 7 a 8. Aromaprofily všech analyzovaných destilátů spojuje přítomnost 2-fenylethanolu (RI = 1112), ethyl kaprylátu (RI = 1196), ethyl kaprinátu (RI = 1396), ethyl laurátu (RI = 1594) a ethyl palmitátu (RI = 1993).

Nejmenší podíl ethyl esterů kyseliny kaprinové, kaprylové a laurové ze všech analyzovaných destilátů byl nalezen v aromaprofilu pampeliškového destilátu, a to v množství 0,17 rel. %, 0,09 rel. % a 0,11 rel. %. Největší podíl ethyl kaprylátu byl nalezen v aromaprofilu mandlovice (28,44 rel. %) a o téměř 11 rel. % méně, v aromaprofilu destilátu z vinné révy, tj. 17,66 rel. %. Vysoké množství ethyl kaprinátu pak bylo nalezeno v aromaprofilu višňovice 1 (62,1 rel. %), vínovice (56,73 rel. %) a višňovice 2 (55,81 rel. %). V aromaprofilech všech ostatních analyzovaných destilátů byl ethyl kaprinát detekován v množství pod 30 rel. %. V aromaprofilu višňovice 2 bylo nalezeno největší zastoupení ethyl laurátu, ze všech analyzovaných destilátů, a to 24,1 rel. %. Relativní zastoupení ethyl palmitátu ve všech aromaprofilech nepřesahuje hodnotu 1,34 rel. %.

Ve všech aromaprofilech analyzovaných destilátů, kromě pampeliškovice, byl dále nalezen ethyl butyrát (RI = 803), jehož relativní zastoupení nepřevyšuje hodnotu 0,45 rel. % a ethyl kapronát (RI = 999), jehož relativní zastoupení nebylo vyšší než 5,02 rel. %. Významný podíl diethyl sukcinátu (RI = 1180) byl nalezen v aromaprofilu pampeliškovice

(11,35 rel. %). V množství pod 0,7 rel. % byl detekován fenethyl acetát (RI = 1253), a to ve všech analyzovaných vzorcích, kromě destilátu z ořechu a květu černého bezu. Nález 3-methylbutyl oktanoátu (RI = 1447) a 2-methylbutyl oktanoátu (RI = 1448) v pálenkách z bezového květu, višni, vinné révy a mandle nepřesahoval 1,64 rel. %. 3-Methylbutyl oktanoát byl navíc identifikován v aromaprofilu ořechovice, bezinkovice a dýňovice. Největší množství ethyl myristátu (RI = 1793) bylo identifikováno v aromaprofilech ořechovice a obou vzorcích višňových destilátů, avšak jejich relativní zastoupení ve všech analyzovaných destilátech nepřesahovalo 1,01 rel. %. Fenylethyl oktanoát (RI = 1843) byl detekován taktéž v aromaprofilech všech vzorků, kromě destilátu z pampelišky a višně 2, v zastoupení pod 1,58 rel. %.

Nejvíce sloučenin monoterpenického charakteru bylo identifikováno v aromaprofilu destilátu z bezového květu (32,99 rel. %). Největší zastoupení v aromaprofilu tohoto destilátu pokrýval limonen (RI = 1027), a to 30,77 rel. %. Z oxidovaných monoterpenů byl nejčastěji v aromaprofilech netradičních druhů destilátů linalool (RI = 1099) a α -terpineol (RI = 1194). Linalool byl detekován v aromaprofilech všech vzorků, kromě dýňovice, mandlovice, višňovice 1 a 2, zatímco α -terpineol nebyl identifikován pouze v aromaprofilu bezinkovice, dýňovice a mandlovice. Významné množství oxidovaných monoterpenů bylo nalezeno v profilu těkavých látek pampeliškového destilátu, a to konkrétně 5,22 rel. % 4-terpineolu (RI = 1178) a 2,18 rel. % citronellolu (RI = 1227).

Z fenolických derivátů se čteněji v destilátech vyskytoval eugenol (RI = 1351) a 2,4-di-*tert*-butylfenol (RI = 1507). 2,4-Di-*tert*-butylfenol (RI = 1507) byl v poměrně vysokém množství identifikován v aromaprofilu malinovice (42,56 rel. %), žitné (22,31 rel. %), dýňovice (18,02 rel. %) a bezinkovice (15,79 rel. %).

Další významnou skupinou byla trojice kyselin, a to kyseliny kaprylové (RI = 1176), kaprinové (RI = 1373) a laurové (RI = 1566). Z tabulky 4, je patrné, že zatímco ethyl estery zmíněných kyselin byly obsaženy ve všech analyzovaných destilátech, samotné kyseliny byly identifikovány pouze v některých z nich. Největší podíl kyseliny kaprinové a kaprylové bylo nalezeno v aromaprofilu pampeliškového destilátu, a to 57,09 rel. % a 6,98 rel. %. Kyselina laurová byla nejvíce zastoupena v aromaprofilu dýňového (3,24 rel. %) a žitného destilátu (3,21 rel. %). Všechny zmíněné kyseliny byly detekovány v profilech těkavých látek destilátů z dýně, pampelišky, žita, višně 2, vinné révy a mandle. Přítomnost kyseliny

kaprylové byla identifikována navíc v bezinkovici, kyselina kaprinová byla detekována jak v bezinkovici, tak v destilátu z bezového květu.

Nejvíce acetalů, z hlediska relativního zastoupení, bylo identifikováno v aromaprofilu ořechovice (16,85 rel. %) a vínovice (3,63 rel. %). Na relativním zastoupení acetalů v aromaprofilech těchto destilátů se největší měrou podílel nonanal diethylacetal (RI = 1382), a to 16,81 rel. % v ořechovici a 3,63 rel. % ve vínovici.

Detailnější složení aromaprofilů jednotlivých destilátů je diskutováno pro jednotlivé analyzované vzorky zvlášť (kapitola 3.1.1.3).

3.1.1.3 Složení aromaprofilů destilátů podle zastoupení jednotlivých sloučenin

Mezidruhové porovnání z hlediska profilů těkavých látek se týká všech analyzovaných speciálních druhů destilátů. Kromě toho, bylo složení speciálních destilátů porovnáváno s dostupnou literaturou. Pro některé z nich však nebyla nalezena příslušná literatura, přesně popisující aromaprofil těkavých látek ve stejných druzích destilátů, které byly analyzovány. Výroba těchto druhů je považována spíše za kuriozitu mezi destiláty, která je soustředěna zejména do evropských zemí, kde jsou vyráběny produkce malých objemů v domácích či pěstitelských pálenicích. Kompromisem bylo porovnání profilu těkavých látek v destilátech s těkavými látkami nacházející se v samotné surovině, extraktu či oleji. V případě destilátu z vinné révy byla pro porovnání vybrána brandy z komerčního lihovaru, avšak pro žitný destilát nebyla nalezena příslušná literatura. Porovnání bylo provedeno většinou na základě podobnosti látek přítomných v obou porovnávaných vzorcích, méně často i na základě kvantitativních údajů, které mohou být ovlivněny použitou metodou extrakce těkavých látek z destilátu. U každého analyzovaného destilátu je uvedena patřičná literatura, s níž bylo složení daného destilátu porovnáváno, včetně údajů o analýze, způsobu izolace sloučenin, či způsobu vyhodnocení chromatografických dat.

- OŘECHOVÝ DESTILÁT

Největší podíl látek v aromaprofilu ořechové pálenky, konkrétně 56,59 rel. %, tvoří estery. Druhou největší skupinu látek v aromaprofilu ořechovice tvoří acetal, které pokrývají 16,85 rel. %. Většinu zastoupení acetalů v aromaprofilu tvoří nonanal diethylacetal s 16,81 rel. %. Ze skupiny kyselin byla v aromaprofilu ořechové pálenky identifikována kyselina linolová (0,05 rel. %) a linolenová (0,04 rel. %). Největší podíl relativního zastoupení esterů v aromaprofilu zaujímá ethyl kaprylát, ethyl kaprinát, ethyl kapronát

a ethyl laurát. Ethyl laurát byl v aromaprofilu ořechovice zastoupen v množství 16,04 rel. %, zatímco ethyl kapronát zaujímal pouze 1,26 rel. %. V profilu těkavých sloučenin ořechové pálenky bylo dále nalezeno 12,04 rel. % ethyl kaprylátu a o 4,89 rel. % více, tj. 16,93 rel. % ethyl kaprinátu. V aromaprofilu ořechového destilátu bylo identifikováno velké množství terpenických látek. Relativní zastoupení monoterpenů, jako je α -pinen, kamfen, β -myrcen, α -felandren, 3-karen, *p*-cymen, α -ocimen a terpinolen, však nepřevyšovalo hodnotu 0,22 rel. %. Výjimku tvoří zastoupení 0,64 rel. % limonenu a 0,48 rel. % γ -terpinenu. Oxidovaných monoterpenů, jako 1,8-cineolu, fenchonu a linaloolu, bylo nalezeno kolem 0,08 rel. %, s výjimkou 4-terpineolu, který byl v aromaprofilu zastoupen v množství 0,6 rel. %. Zastoupení sekviterpenů v profilu těkavých látek nepřevyšoval hodnotu 0,5 rel. %. Z identifikovaných seskviterpenů lze jmenovat (*E*)- β -karyofyllen, α -karyofyllen, α -muurolen a (*E,E*)- α -farnesen. Z oxidovaných seskviterpenů byl v aromaprofilu nejvýznamnější obsah 1,19 rel. % (*E*)-nerolidolu a 0,67 rel. % akorenonu B, který s největší pravděpodobností pochází z puškvorce obecného, který byl spolu s dalšími bylinami použit při přípravě směsi líh-ořechy-byliny před destilací.

- MANDLOVÝ DESTILÁT

Podle profilu těkavých látek mandlového destilátu lze říci, že se jedná o destilát s malým počtem identifikovaných těkavých látek, který nebyl pestrý z pohledu různorodosti identifikovaných skupin látek. Identifikováno bylo celkem 33 sloučenin, z toho 28 esterů, což odpovídá 77,83 rel. %. V aromaprofilu mandlového destilátu byly identifikovány ještě kyseliny, aldehyd a alkohol. Z esterů byl v aromaprofilu nejvíce zastoupen ethyl kaprylát, který se podílel 28,44 rel. %, což je o 16,4 rel. % větší podíl, než v ořechovici. V aromaprofilu bylo dále nalezeno 27,92 rel. % ethyl kaprinátu. Stejně jako v aromaprofilech všech analyzovaných destilátů byl i v tomto identifikován ethyl laurát (7,96 rel. %) a ethyl kapronát (5,02 rel. %). Benzaldehyd, jako jediný identifikovaný zástupce ze skupiny aldehydů, byl v aromaprofilu zastoupen v množství 10,52 rel. %, což bylo nejvíce ze všech analyzovaných destilátů. Ze skupiny alkoholů bylo detekováno pouze 0,1 rel. % 2-fenylethanolu. Celkové relativní zastoupení kyselin v aromaprofilu (3,93 %) bylo z největší části tvořeno kyselinou kaprinovou (3,16 rel. %). Z kyselin byla dále identifikována kyselina kaprylová (0,52 rel. %) a laurová (0,25 rel. %). V aromaprofilu mandlovice nebyly identifikovány acetyly, fenolické deriváty, apokarotenoidy, laktony, alifatické ani aromatické uhlovodíky, terpenické estery, ethery, mono- a seskviterpeny, ani jejich oxidované formy.

Složení těkavých látek ořechového a mandlového destilátu, které je uvedeno výše, bylo porovnáváno s publikací **María del Mar Caja a kol.** [129]. Autorka publikovala studii o analýze těkavých látek v oleji z různých druhů ořechů, mimo jiné v oleji z vlašského ořechu a mandle. Tato publikace byla použita pro porovnání těkavých látek v olejích s destilátem z ořechů a mandlí. Oleje byly izolovány parní destilací s dichlormethanem a analyzovány pomocí plynové chromatografie s hmotnostní detekcí. Obsah těkavých látek v ořechových extraktech autorka uvádí v relativním zastoupení ploch píků z GC-MS analýzy. V oleji z vlašských ořechů tvořil největší relativní zastoupení nonanal s 9,24 %, zatímco v aromaprofilu ořechovice bylo detekováno pouze stopové množství nonanal. I přesto, že v aromaprofilu ořechovice bylo detekováno 0,12 rel. % benzaldehydu, v ořechovém oleji nebyl vůbec identifikován. V oleji z vlašských ořechů bylo identifikováno, kromě nonanal, ještě 8 dalších sloučenin, z nichž ani jedna nebyla v aromaprofilu ořechovice identifikována. Největší podíl relativního zastoupení v tomto oleji tvoří zmiňovaný nonanal, dále hexenal (3,57 %) a 2,4-heptadienal (3,23 %). V ořechovici bylo identifikováno 99 sloučenin, zatímco v oleji z vlašských ořechů bylo pouze 9 látek za daných experimentálních podmínek. V ořechovici byl nejvíce zastoupen ethyl kaprinát (16,93 rel. %), nonanal diethylacetal (16,81 rel. %), dále ethyl laurát (16,04 rel. %), ethyl kaprylát (12,04 rel. %) a ethyl kapronát (1,26 rel. %). V mandlovém oleji byl detekován nonanal, konkrétně v množství 0,62 %, avšak v mandlovici nebyl vůbec identifikován. V aromaprofilu mandlového oleje i mandlovici byl identifikován benzaldehyd, a to v poměrně velkém zastoupení. V mandlovém oleji byly identifikovány, kromě benzaldehydu a nonanal, ještě 3 další aldehydy, které v mandlovici identifikovány nebyly, a to hexenal (0,93 %), dekadienal (0,73 %) a (*E,E*)-2,4-dekadienal (1 %). V aromaprofilu mandlovici bylo danou metodou identifikováno 33 těkavých látek, z nichž nejvíce byl zastoupen ethyl kaprylát (28,44 rel. %) a ethyl kaprinát (27,92 rel. %).

- BEZINKOVÝ DESTILÁT

V aromaprofilu destilátu z plodů černého bezu, resp. bezinkového destilátu (bezinkovice), bylo nalezeno 48,77 rel. % esterů a 15,79 rel. % fenolických derivátů. Skupinu fenolických derivátů zastupuje pouze 2,4-di-*tert*-butylfenol, který pokrývá celé jejich procentuální zastoupení v profilu těkavých látek. Z celkového relativního zastoupení skupiny esterů v aromaprofilu bezinkovice, připadají 29,16 rel. % ethyl kaprinátu, 8,27 rel. % ethyl kaprylátu a 7,17 rel. % ethyl laurátu. Jediným identifikovaným aromatickým uhlovodíkem v aromaprofilu bezinkovice byl 1,3-di-*tert*-butylbenzen s podílem 6,97 rel. %. Celkový podíl kyselin, tj. 7,82 rel. %, se rozděluje mezi kyselinu kaprylovou (0,72 rel. %)

a kyselinu kaprinovou (7,1 rel. %). V aromaprofilu bezinkovice nebyl nalezen žádný zástupce ze skupiny monoterpenů, seskviterpenů ani oxidovaných seskviterpenů, kromě oxidovaného monoterpenu linaloolu (0,08 rel. %).

K porovnání bezinkového destilátu s literaturou byl použit krátký článek, který publikoval **Ağalar D. H. a kol.** [130]. Jednalo se o studii těkavých látek v plodech černého bezu (*Sambucus nigra L.*). K izolaci těkavých látek ze sušených bezinek použil mikrodestilaci vodní parou a jako analytickou metodu analýzu GC-FID a GC-MS. Identifikace látek, stejně jako v případě bezinkového destilátu, probíhala na základě retenčních indexů a hmotnostních spekter. V aromaprofilu extraktu ze sušených bezinek bylo identifikováno 34 těkavých látek, což je obdobné jako v případě bezinkovice, v jejímž aromaprofilu bylo identifikováno 36 sloučenin. Obsah jednotlivých látek v extraktu z bezinek Ağalar vztahuje na procentuální obsah ve vzorku, podobně jsou vypočteny kvantitativní údaje bezinkového destilátu, jako relativní zastoupení dané látky v procentech. Nejvíce zastoupenými látkami v bezinkovém extraktu byly fenylacetaldehyd (32,3 %), benzaldehyd (7,9 %), ethyl linolát (5,4 %), vinyl guaicol (4,94 %) a linalool (4,5 %). V bezinkovici byly z těchto látek identifikovány pouze benzaldehyd a linalool, jež byly v aromaprofilu zastoupeny v množství 0,09 rel. % a 0,08 rel. %. Největší zastoupení v aromaprofilu bezinkového destilátu tvoří ethyl kaprinát (29,16 rel. %) a fenolický derivát 2,4-di-*tert*-butylfenol (15,79 rel. %).

- DESTILÁT Z KVĚTU ČERNÉHO BEZU

Poměrně velký počet látek (64) byl identifikován v aromaprofilu destilátu z květu černého bezu, dále nazývaného bezový destilát nebo bezovice. Největší podíl identifikovaných látek v aromaprofilu tvoří estery (57,73 rel. %) a monoterpeny (32,99 rel. %). Z acetalů byl v aromaprofilu bezového destilátu nejvíce zastoupen isobutanal diethylacetal, který zaujímal 0,06 rel. %. Dále bylo v bezovém aromaprofilu detekováno 0,03 rel. % isovaleraldehyd diethylacetalu a 0,04 rel. % acetaldehyd ethylamylacetalu. Z kyselin byla identifikována kyselina kaprinová v množství 0,15 rel. %, která byla v aromaprofilu bezinkovice nalezena v množství 7,1 rel. %. Ze skupiny vyšších alkoholů bylo v profilu těkavých látek destilátu z květu černého bezu nalezeno 0,05 rel. % 2-fenylethanolu a 0,15 rel. % *n*-dekanolu. Dále bylo v bezovém aromaprofilu nalezeno 0,07 rel. % dodekanalu a 0,05 rel. % *n*-dekanalu. Dodekanal ani *n*-dekanal však nebyly vůbec identifikovány v aromaprofilu bezinkového destilátu. Největší relativní zastoupení ze skupiny esterů v aromaprofilu zaujímal ethyl kaprinát (26,49 rel. %), ethyl laurát (12,88 rel. %)

a ethyl kaprylát (6,6 rel. %). V aromaprofilu bezového destilátu bylo tedy nalezeno o 1,67 rel. % méně ethyl kaprylátu a o 2,67 rel. % méně ethyl kaprinátu, než v případě bezinkovice. Dále bylo detekováno 4,23 rel. % 3-methylbutyl dekanoátu a 0,62 rel. % jeho izomeru 2-methylbutyl dekanoátu. I přesto jejich zastoupení v aromaprofilu tohoto destilátu bylo nejvyšší ze všech analyzovaných vzorků, v jejichž aromaprofilech byly tyto dvě látky identifikovány. Aromaprofil bezového destilátu, v porovnání s ostatními analyzovanými druhy, vykazoval největší podíl monoterpenů, a to 32,99 rel. %. Z monoterpenů byl nejvíce aromaprofilu bezového destilátu zastoupen limonen (30,77 rel. %) a γ -terpinen (1,24 rel. %). Aromaprofil tohoto destilátu vykazoval nejvyšší zastoupení limonenu ze všech analyzovaných druhů destilátů. Další monoterpeny, jako terpinolen, *p*-cymen, (*E*)- a (*Z*)- β -ocimen, β -myrcen, α - a β -pinen a *p*-cymen, byly detekovány v množství menším než 0,64 rel. %. Ze skupiny seskviterpenů lze jmenovat valencen (0,29 rel. %), β -bisabolen (0,12 rel. %) a (*E*)- α -bergamoten (0,05 rel. %), které byly identifikovány pouze v aromaprofilu tohoto destilátu. Z oxidovaných monoterpenů byl nejvíce zastoupen α -terpineol a citronellol, oba v podílu 0,47 rel. %, také linalool (0,36 rel. %) a 4-terpineol v podílu 0,48 rel. %. Dále byl identifikován linalool ethyl ether, ze skupiny terpenických etherů, v množství 0,14 rel. %.

Složení těkavých látek v destilátu z květu černého bezu bylo porovnávalo s těkavými sloučeninami přítomnými v bezovém květu. **Ángelo C. Salvador a kol.** [131] publikoval článek o analýze profilu těkavých a netěkavých metabolitů v bezovém květu (*Sambucus nigra* L.), v závislosti na posklizňových podmínkách pomocí dvoudimenzionální plynové chromatografie s hmotnostní detekcí. K zakoncentrování a izolaci analytů použil metodu mikroextrakce tuhou fází v headspace uspořádání, stejně jako v případě analýzy aromaprofilu bezového destilátu. V článku autor uvádí pouze tabulku identifikovaných metabolitů bez jejich relativního zastoupení. V bezovém destilátu byla zjištěna přítomnost 7 monoterpenů a 7 oxidovaných monoterpenů, které byly identifikovány i při analýze bezového květu. Ze skupiny monoterpenů zastoupených v obou porovnávaných vzorcích lze jmenovat α - a β -pinen, β -myrcen, *p*-cymen, ocimen, *p*-cymenen a terpinolen. Dále byly jak v bezovém destilátu, tak v bezovém květu nalezeny oxidované monoterpeny, jako 1,8-cineol, linalool oxid, linalool, nerol oxid, Bois de Rose oxid, 4-terpineol a α -terpineol. Další sloučeniny, které byly identifikovány při analýze bezového květu, však nebyly nalezeny v bezovém destilátu. Tento rozdíl může být zapříčiněn buď způsobem analýzy, nebo změnami ve složení látek při výrobě této pálenky.

K porovnání složení těkavých látek v aromaprofilu bezového destilátu byl dále použit článek **Al-Jabri N. N. a kol.** [132], který publikoval o chemickém složení esenciálního oleje z citronu. Citronový olej byl získán hydrodestilací citronu. Analýza citronového oleje byla provedena pomocí plynové chromatografie s hmotnostní detekcí. Kvantitativní údaje složení těkavých látek v citronovém oleji autor článku uvádí v procentech. Podle informací od výrobce destilátu byly do bezového kvasu přidávány citrony, tudíž některé sloučeniny z bezového aromaprofilu mohou pocházet právě z citronu. Porovnáním dat bylo zjištěno, že většina identifikovaných látek v citronovém oleji byla přítomna i v bezovém destilátu. Největší podíl v citronovém oleji tvoří limonen (84,73 %), který v aromaprofilu bezového destilátu zaujímá 30,77 rel. %. Mezi další sloučeniny s významným zastoupením v citronovém oleji patří β -pinen (3,36 %), α -pinen (1,06 %), α -terpineol (2,8 %), 4-terpineol (1,18 %) a β -myrcen (2,16 %), které byly přítomny i v aromaprofilu bezového destilátu v množství menším než 0,5 rel. %. Ostatní látky identifikované v citronovém esenciálním oleji, jako např. β -bisabolen, valencen, linalool a cymen byly taktéž identifikovány i v aromaprofilu bezového destilátu v rozmezí 0,12 – 0,36 rel. %.

- DÝŇOVÝ DESTILÁT

V aromaprofilu dýňového destilátu bylo identifikováno pouze 31 sloučenin, což je druhý nejmenší počet identifikovaných látek z aromaprofilů všech analyzovaných destilátů. Nejpočetnější skupinou, z hlediska počtu identifikovaných látek v aromaprofilu byly estery, které zaujímají podíl 37,95 rel. %. Dýňový destilát ve svém aromaprofilu obsahoval 19,57 rel. % kyselin a 18,16 rel. % fenolických derivátů. Z fenolických derivátů byly identifikovány 2 sloučeniny, konkrétně 2,4-di-*tert*-butylfenol (18,02 rel. %) a *p*-ethylguaiakolu (0,14 rel. %), který byl identifikován pouze v aromaprofilu dýňového destilátu. V aromaprofilu tohoto vzorku bylo nalezeno také 6,01 rel. % aromatického uhlovodíku 1,3-di-*tert*-butylbenzenu. Aromaprofil dýňovice poukazoval na přítomnost kyseliny laurové (3,24 rel. %), kaprylové (1,22 rel. %), kaprinové (15,11 rel. %) a taktéž k nim příslušných ethylesterů. Ethyl kaprylát zaujímal v aromaprofilu dýňovice 5,82 rel. %, dále bylo detekováno 5,43 rel. % ethyl laurátu a 21,94 rel. % ethyl kaprinátu. Apokarotenoidy, laktony, terpenické látky či jejich oxidované formy nebyly v aromaprofilu dýňového destilátu identifikovány.

K porovnání aromaprofilu analyzované dýňové pálenky byl použit článek od **Pranabendu Mitra a kol.** [133], kteří se zabývali extrakcí a analýzou dýňového oleje

ze semen dýně obrovské (*Cucurbita maxima*). K extrakci oleje byla použita optimalizovaná metoda extrakce nadkritickou tekutinou (CO₂). Analýza mastných kyselin v dýňovém oleji byla provedena tenkovrstvou chromatografií a taktéž plynovou chromatografií s plamenově-ionizační detekcí. Mastné kyseliny identifikované v dýňovém oleji byly porovnávány s kyselinami přítomnými v aromaprofilu dýňovice. Autorka uvádí, že extrakcí nadkritickou tekutinou a následnou GC-FID analýzou bylo zjištěno, že olej z dýňových semen obsahoval 4 hlavní mastné kyseliny, tj. kyselinu palmitovou (13,8 %), stearovou (11,2 %), olejovou (29,5 %) a linolovou (45,5 %). Oproti tomu při izolaci a stanovení těkavých látek v dýňovém destilátu byla zjištěna přítomnost kyseliny kaprinové (15,11 rel. %), kaprylové (1,22 rel. %) a laurové (3,24 rel. %).

- MALINOVÝ DESTILÁT

Z hlediska počtu identifikovaných sloučenin byl aromaprofil malinového destilátu vůbec nejjednodušší ze všech analyzovaných druhů. Identifikováno bylo pouze 26 sloučenin. Největší relativní zastoupení ze všech látek s 42,56 rel. % zaujímá 2,4-di-*tert*-butylfenol, jediný zástupce skupiny fenolických derivátů. Skupina 17 identifikovaných esterů zaujímá necelých 21 rel. % z aromaprofilu malinového destilátu. Ze skupiny esterů bylo v aromaprofilu nalezeno 6,43 rel. % ethyl kaprinátu, ethyl kaprylát byl zastoupen v podílu 4,12 rel. %. Dále bylo v profilu těkavých látek malinovice nalezeno 0,48 rel. % apokarotenoidu (*E*)- β -iononu, který byl identifikován pouze v aromaprofilu tohoto destilátu. V aromaprofilu malinovice byly dále identifikovány 2 zástupci ze skupiny aldehydů a ketonů, a to benzaldehyd (0,26 rel. %) a benzofenonu (0,24 rel. %). V aromaprofilu malinovice nebyly identifikovány žádné sloučeniny ze skupiny kyselin, acetalů, monoterpenů, seskviterpenů ani oxidovaných. Ze skupiny oxidovaných monoterpenů byly přítomny pouze linalool a α -terpineol, a to pouze v množství 0,23 rel. % a 0,34 rel. %.

Článek **Eleny Ibáñez** [134] popisující analýzu těkavých látek v různých druzích ovoce byl použit pro porovnání složení malinového destilátu s malinami. Extrakce těkavých látek v malinách byla provedena metodou HS-SPME s následnou analýzou pomocí GC-MS. Autorka analyzovala celkem 5 druhů ovoce, a to jahody, maliny, ostružiny, banány a mango. Publikace nezahrnuje data z celého profilu identifikovaných těkavých látek, ale pouze poukazuje na vybrané části chromatogramů. Množství jednotlivých identifikovaných těkavých látek pak autorka neuvádí. Analýzou malin byla identifikována přítomnost linaloolu, citralu, linalyl acetátu, terpinolenu a β -iononu. Při pohledu na tabulku 4 je patrné, že

v aromaprofilu malinovice byl taktéž nalezen linalool a dále (*E*)- α -iononu, namísto β -iononu. V aromaprofilu malinového destilátu bylo nalezeno 0,23 rel. % linaloolu a 0,48 rel. % (*E*)- α -iononu, avšak linalyl acetát, citral ani terpinolen nebyly v tomto aromaprofilu identifikovány.

- PAMPELIŠKOVÝ DESTILÁT

Největší relativní zastoupení v aromaprofilu pampeliškovice zaujímá skupina kyselin, a to 67,59 rel. %. Jediný pampeliškový destilát z analyzované řady destilátů obsahoval v profilu těkavých látek větší podíl kyselin, než esterů (14,63 rel. %), neboť v aromaprofilech ostatních analyzovaných destilátů tvoří estery dominantní skupinu látek. Právě v tomto aromaprofilu byl detekován největší podíl kyselin ze všech analyzovaných vzorků, konkrétně byla identifikována kyselina kaprinová (57,09 rel. %), kaprylová (6,98 rel. %), laurová (2,04 rel. %), pelargonová (1,36 rel. %) a kapronová (0,12 rel. %). Dále se tento destilát vyznačuje nejvyšším zastoupením 2-fenylethanolu v aromaprofilu (0,34 rel. %), který byl identifikován ve všech analyzovaných vzorcích, kromě višňovice 2. Významné je i zastoupení 0,34 rel. % benzofenonu. Dále byl detekován diethyl sukcinát se zastoupením 11,35 rel. %. Aromaprofil pampeliškovice dále obsahuje fenethyl acetát, ethyl isopentyl sukcinát, (*E*)-ethyl-cinnamát a ethyl laktát (0,32 – 0,67 rel. %). Profil těkavých látek identifikovaných v pampeliškovém destilátu neobsahoval žádné seskviterpeny, pouze oxidovaný seskviterpen α -bisabolol oxid B (0,12 rel. %). Jediným nalezeným monoterpenem v aromaprofilu pampeliškového destilátu byl terpinolen (0,04 rel. %). Významně se na složení aromaprofilu pampeliškovice podílely oxidované monoterpeny, nejvíce 4-terpineol (5,22 rel. %) a citronellol (2,18 rel. %). Skupinu fenolických derivátů zde reprezentuje 2,4-di-*tert*-butylfenol (3,57 rel. %). Dále byl v aromaprofilu nalezen eugenol (0,36 rel. %) a 3,4-dimethoxystyren (0,08 rel. %), který byl nalezen při daných podmínkách měření pouze v aromaprofilu pampeliškovice. Významný byl nález γ -dodekalaktonu v množství 0,18 rel. %, což je nejvyšší zastoupení tohoto laktonu mezi všemi analyzovanými aromaprofily.

Pampeliškový destilát byl porovnáván s publikací **Ivanov I. a kol.** [135], který publikoval článek o analýze pampelišek (*Taraxacum officinale* L., Weber a F.H. Wigg.) s použitím GC-MS a studiu jejich antioxidačních vlastností. V této studii porovnával relativní zastoupení fytochemických sloučenin v *n*-hexanové frakci u třech typů pampeliškových vzorků, odebraných před květem, během květu a po odkvětu. Usušené vzorky pampelišky byly extrahovány *n*-hexanem a poté přímo dávkovány do GC-MS. Autor uvádí množství

identifikovaných látek v pampelišce v relativních procentech. Porovnání pampeliškového destilátu bylo provedeno se vzorkem pampelišky v květu, neboť na výrobu pampeliškového kvasu byl použit květ. V pampeliškovém destilátu nebyl identifikován žádný alifatický uhlovodík, zatímco pampeliškový extrakt obsahoval stopová množství *n*-dodekanu, *n*-tridekanu a *n*-tetradekanu. Při porovnání celkového relativního zastoupení skupin látek lze konstatovat, že obsah mastných kyselin v profilu pampelišky v květu byl stanoven na 1,1 % ploch píků v TIC. V aromaprofilu pampeliškovice byly kyseliny nalezeny v množství 67,59 rel. %. Nejvíce zastoupenou kyselinou v profilu těkavých látek pampeliškovice byla kyselina kaprinová, pokrývající 57,09 rel. %. Dále bylo v aromaprofilu pampeliškovice nalezeno významné zastoupení kyseliny kaprylové (6,98 rel. %) a kyseliny laurové (2,04 rel. %), které při analýze extraktu pampeliškového květu nebyly v aromaprofilu identifikovány. Obsah mastných alkoholů v pampeliškovém květu dosahoval 26,7 % celkové plochy píků v TIC (nejvyšší zastoupení fytol, 15,7 %). Jediným identifikovaným alkoholem v aromaprofilu pampeliškového destilátu byl 2-fenylethanol, který zaujímal 0,34 rel. %. Ostatní fytochemické sloučeniny, jež byly identifikovány v pampeliškovém extraktu, nebyly při analýze pampeliškové pálenky vůbec identifikovány.

- ŽITNÝ DESTILÁT

V žitném destilátu bylo identifikováno 38 chemických sloučenin. Při pohledu na tabulku 3, je zřejmé, že nejvíce se na složení žitného destilátu podílí estery (24,36 rel. %), fenolické deriváty (22,4 rel. %) a kyseliny (21,96 rel. %). Z esterů byl v největším podílu v aromaprofilu žitného destilátu zastoupen ethyl kaprinát (9,49 rel. %), ethyl kaprylát (4,83 rel. %) a ethyl laurát (3,4 rel. %). Další estery, jako např. ethyl kapronát, isoamyl acetát, ethyl hydrocinnamát nebo fenethyl oktanoát, byly nalezeny v zastoupení menším než 1,15 rel. %. Největší podíl ze skupiny kyselin má bezpochyby kyselina kaprinová, která se na složení aromaprofilu podílela 16,31 rel. %. Kyselina kaprylová zaujímá v aromaprofilu žitného destilátu 2,44 rel. % a kyselina laurová 3,21 rel. %. Dále byly v aromaprofilu žitné pálenky identifikovány alkoholy, zejména 2-nonanolu, 2-fenylethanolu, 1-hexanolu v rozmezí 0,07 až 0,23 rel. % a taktéž benzaldehyd (0,09 rel. %). Ve výrazně vyšším podílu byl v aromaprofilu žitné zastoupen aromatický uhlovodík 1,3-di-*tert*-butylbenzen (7,57 rel. %). Žitný destilát obsahoval jako jediný z analyzované řady monoterpenický ester menthyl acetát, avšak pouze v množství 0,42 rel. %. V aromaprofilu zmíněné pálenky nebyly nalezeny apokarotenoidy, laktony, monoterpeny, seskviterpeny ani v oxidované formě. Z oxidovaných monoterpenů lze jmenovat α -terpineol a linalool, které byly v žitné pálence přítomny

v množství 0,19 rel. % a 0,09 rel. %. Pro porovnání žitného destilátu s literaturou nebyl nalezen vhodný zdroj.

- VIŠŇOVÉ DESTILÁTY

Z tabulky 3 a 4 je patrná nestejnorodost složení těkavých látek v aromaprofilech obou analyzovaných višňových destilátů, a to i z pohledu jejich relativního zastoupení. Společným rysem aromaprofilů obou višňovic je vysoký obsah esterů. V aromaprofilech višňovice 1 zaujímaly estery 92,64 rel. % a višňovice 2 o něco více, konkrétně 93,74 rel. %. Největší podíl esterů v obou aromaprofilech tvoří ethyl kaprinát, a to 62,1 rel. % v prvním destilátu a 66,81 rel. % v druhém. Dalším esterem významně zastoupeným v aromaprofilech obou analyzovaných višňovic byl ethyl laurát, který byl identifikován ve všech analyzovaných destilátech, avšak v aromaprofilu višňovice 2 byl nalezen v největším množství, a to 24,1 rel. %. Aromaprofil obou višňových destilátů obsahovaly ethyl kaprylát, který byl ve višňovici 1 zastoupen 4,57 rel. % a ve višňovici 2 o 0,5 rel. % více, tedy 5,07 rel. %. V obou aromaprofilech byl dále nalezen seskviterpenický ester 2,3-dihydrofarnesyl acetát, v množství 0,26 rel. % a 0,07 rel. %. Stejně tak, aromaprofil višňovice 1 i 2 obsahoval fenolický derivát eugenol, a to v podílu 0,53 rel. % a 0,32 rel. %. V aromaprofilech obou višňových destilátů byly přítomny aldehydy, jejichž celkový podíl připadal pouze na benzaldehyd a (*E*)-cinamaldehyd. Celkové relativní zastoupení aldehydů ve višňové pálenice 1 bylo 0,93 rel. %, z toho 0,78 rel. % zaujímal benzaldehyd, zatímco ve višňovici 2 bylo celkové zastoupení 0,43 rel. %, z nichž 0,35 rel. % zaujímal benzaldehyd, typicky vznikající v pálenkách z peckovitého ovoce. V aromaprofilech obou destilátů byly nalezeny monoterpeny, seskviterpeny, oxidované monoterpeny, fenolické deriváty a laktony, avšak apokarotenoidy ani monoterpenické estery nebyly identifikovány. γ -Undekalakton, který byl identifikován pouze ve višňových destilátech, zaujímal 0,31 rel. % a 0,24 rel. %. Aromaprofil višňovice 1 obsahoval 1,11 rel. % oxidovaných seskviterpenů, což připadá na jedinou sloučeninu (*E*)-2,3-dihydrofarnesol, který byl za daných podmínek identifikován pouze v tomto destilátu. Při vzájemném porovnání obou analyzovaných višňových pálenek bylo zjištěno, že v aromaprofilu destilátu 1 byly navíc identifikované acetaly (0,3 rel. %) a alkoholy (0,02 rel. %). Celkový podíl alkoholů v aromaprofilu připadá pouze na 2-fenylethanol. Ze skupiny acetalů bylo v aromaprofilu višňovice 1 nalezeno 0,17 rel. % isobutanal diethylacetalu, 0,07 rel. % isovaleraldehyd diethylacetalu a 0,06 rel. % acetaldehyd ethylamylacetalu. Podíl 1,33 rel. % v aromaprofilu višňovice 2 zaujímají kyseliny, a to kyselina laurová (0,62 rel. %), kaprinová (0,61 rel. %) a kaprylová (0,1 rel. %).

Žádná, ze jmenovaných kyselin, nebyla identifikována v aromaprofilu višňového destilátu 1. Při porovnání profilů těkavých látek višňovice 2 s prvním destilátem, byl v aromaprofilu višňovice 1 nalezen linalool ethyl etheru v množství 0,04 rel. %.

Pro porovnání složení těkavých látek analyzovaných višňových destilátů bylo použito višňové brandy, o jehož složení těkavých látek publikoval článek **Nikičević N. a kol.** [40]. Autor se v článku zabývá problematikou efektu druhu použitých višní na chemické a sensorické vlastnosti výsledného brandy. Ke studiu vybral 5 různých druhů višní, pěstovaných v Srbsku. Višňové brandy bylo po extrakci dichlormethanem simultánně analyzováno pomocí GC-FID a GC-MS. Autor článku uvádí obsah jednotlivých sloučenin v procentech. Pro porovnání obsahu těkavých látek ve višňových pálenkách a srbském višňovém brandy byla vybrána odrůda višně obecné (*Prunus cerasus*) Obláčinska. Při porovnání složení brandy z višně Obláčinska a českých višňových pálenek bylo zjištěno, že obsah všech tří zmíněných pálenek se liší typem identifikovaných látek. Pro všechny vzorky je ale společný obsah benzaldehydu. Višňové brandy obsahovalo 0,27 % benzaldehydu, v aromaprofilech višňovice 1 bylo nalezeno 0,78 rel. % a višňovice 2 0,35 rel. %. Ze skupiny kyselin bylo ve višňovém brandy přítomno 4,64 % kyseliny kaprinové a 1,01 % kyseliny kaprylové. Obě z uvedených kyselin byly taktéž obsaženy v aromaprofilu višňovice 2, 0,61 rel. % kyseliny kaprinové a 0,62 rel. % kyseliny kaprylové. Žádná z uvedených kyselin nebyla identifikována v aromaprofilu višňovice 1. K těmto kyselinám byly nalezeny i jejich estery, a to jak ve višňovém brandy, tak i v českých višňových pálenkách. Ve višňovém brandy byl největším podílem zastoupen ethyl kaprinát, a to 28,44 rel. %, který v aromaprofilech českých višňovic zaujímal 62,10 rel. % a 55,81 rel. %. Dále byl ve višňovém brandy identifikován ethyl kaprylát zaujímavý podíl 19 %, který byl nalezen v menším podílu i v aromaprofilu českých višňovic, v množství 4,57 rel. % a 5,07 rel. %. Z dalších esterů byly, stejně jako ve višňovém brandy, identifikovány ethyl kapronát, 2-fenethyl acetát a isoamyl acetát. I přesto, že zastoupení methyl kaprylátu a methyl kaprinátu v brandy bylo kolem 0,5 %, ani jeden z nich nebyl v aromaprofilech českých destilátů identifikován. Významný podíl 9,11 % v srbském brandy měl ethyl undekanoát, který byl však detekován pouze v množství 0,03 rel. % v aromaprofilu višňovice 2. Stopové množství α -terpineolu bylo nalezeno v srbském brandy, v aromaprofilech českých višňovic bylo nalezeno 0,02 rel. %. V srbském brandy bylo taktéž nalezeno stopové množství limonenu, zatímco v aromaprofilu višňovice 1 byl limonen zastoupen 0,08 rel. % a višňovice 2 0,1 rel. %. Opakem je linalool, který nebyl vůbec identifikován v aromaprofilech višňových destilátů, avšak v brandy zaujímal 0,29 %.

- DESTILÁT Z VINNÉ RÉVY

Aromaprofil destilátu z vinné révy byl bohatý na identifikované těkavé látky. Celkem bylo v tomto destilátu identifikováno 92 různých látek, z nichž 59 připadá na estery s podílem 91,63 rel. %. Největší relativní zastoupení z esterů má v aromaprofilu nepochybně ethyl kaprinát s 56,73 rel. %. Mezi další estery významně podílející na složení aromaprofilu destilátu z vinné révy byl ethyl kaprylát s 17,66 rel. % a ethyl laurát, který byl v tomto destilátu zastoupen v podílu 9,77 rel. %. Druhé největší relativní zastoupení v aromaprofilu zaujímá skupina acetalů s 3,63 rel. %, které připadá pouze na nonanal diethylacetal. Celkové relativní zastoupení seskviterpenů v tomto destilátu bylo 1,18 rel. %. Největší měrou se na zastoupení seskviterpenů podílel (*E,E*)- α -farnesen (1,14 rel. %), zatímco (*E*)- β -karyofyllen a δ -kadinen byly přítomny pouze ve stopovém množství, přičemž (*E*)- β -farnesen, δ -kadinen byly identifikovány pouze v aromaprofilu vínovice. Celkový podíl kyselin v aromaprofilu tohoto destilátu byl 0,59 rel. %, z čehož 0,22 rel. % zaujímala kyselina kaprylová, 0,23 rel. % kyselina laurová, 0,11 rel. % kyselina pelargonová, 0,02 rel. % kyselina kapronová a zbytek tvořila stopová množství kys. isovalerové, kaprinové a linolové. Aromaprofil destilátu z vinné révy obsahoval ještě 0,4 rel. % alkoholů, 0,45 rel. % aldehydů a ketonů a 0,35 rel. % fenolických derivátů. Přítomny byly i alifatické a aromatické uhlovodíky, terpenické látky a jejich oxidované formy, avšak jejich obsah nepřekročil hodnotu 0,32 rel. %.

Destilát z vinné révy byl porovnáván s brandy z komerčního kalifornského lihovaru. **Susan E. Ebeler a kol.** [136] publikovala článek o analýze těkavých látek v brandy pomocí mikroextrakce tuhou fází a extrakce kapalina-kapalina s použitím freonů. Jako analytickou koncovku použila plynovou chromatografii jak s plamenově-ionizační, tak s hmotnostní detekcí. Autorka publikace neuvádí relativní zastoupení identifikovaných sloučenin, proto nemohl být profil těkavých látek z hlediska kvantity porovnán. Z tohoto důvodu byla porovnávána pouze přítomnost identifikovaných látek ve vzorku české vínovice a kalifornské brandy. V brandy bylo identifikováno 24 sloučenin, což je téměř čtyřikrát méně, v porovnání s českou vínovicí, ve které bylo identifikováno 92 sloučenin. Co do počtu látek bylo identifikováno nejvíce esterů, a to jak v aromaprofilu vínovice, tak v brandy. Ze skupiny alkoholů byly v obou destilátech identifikovány hexanol a 2-fenylethanol. V obou destilátech byl přítomen i fenethyl acetát, 3-methylbutyl oktanoát, 3-methylbutyl dekanoát ze skupiny esterů. Aromaprofil vínovice obsahoval navíc velký podíl ethyl kaprinátu a ethyl kaprylátu, jejichž přítomnost v kalifornském brandy autorka článku neuvádí. Společným znakem

vínovice a brandy je přítomnost kyseliny kaprylové, kaprinové a laurové. V profilu těkavých látek vínovice byla dále identifikována kyselina pelargonová, isovalerová, kapronová a linolová.

3.1.2 Časová změna profilu těkavých látek v destilátu

V rámci GC-FID a GC-MS analýzy destilátu z malin byl také vyhodnocen vliv doby skladování na chemické složení jeho aromaprofilu. Porovnání bylo provedeno na základě GC-MS dat s publikací **Bajer a kol.** [127], kde v rámci studie těkavých sloučenin přítomných v různých druzích ovocných destilátů byl analyzován i stejný vzorek malinovice. První analýza a vyhodnocení aromaprofilu malinovice byla provedena v roce 2015 (viz zmíněná publikace). Stejný vzorek byl analyzován s časovým odstupem tří let, a to za stejných extrakčních a chromatografických podmínek, jako ve zmiňované práci.

Porovnáním relativních zastoupení látek v aromaprofilu vzorku byla pozorována řada změn. Největší změna byla zaznamenána v celkovém množství vyextrahovaných látek, což dokládají chromatogramy z GC-MS analýzy před a po uskladnění malinovice, jež jsou uvedeny v příloze 10. Analýzou z roku 2015 byly identifikovány 3 sloučeniny ze skupiny acetalů, které byly zastoupeny v množství menším než 0,1 rel. %, avšak nyní nebyla identifikována žádná sloučenina z této skupiny. Původní analýzou byla v aromaprofilu malinovice zjištěna přítomnost několika alkoholů, největší zastoupení této skupiny zaujímal v aromaprofilu s 3,21 rel. % 3-methyl-1-butanol a s 0,15 rel. % tetradekanol, které v aromaprofilu nebyly nyní vůbec identifikovány. Při původní analýze malinovice bylo v aromaprofilu nalezeno ještě 0,07 rel. % *n*-dekanolu a 0,03 rel. % 1-hexanolu, které taktéž nebyly nyní v aromaprofilu identifikovány. Jediným identifikovaným alkoholem v aromaprofilu malinového destilátu byl 2-fenylethanol, jehož zastoupení v aromaprofilu malinovice vzroslo z původních 0,11 rel. % na 0,77 rel. %.

Autor také uvádí přítomnost 0,46 rel. % (7Z,10Z)-hexadekadienalu, 0,13 rel. % 2,6-di-*tert*-butylchinonu, avšak nyní analýza nepotvrdila přítomnost ani jednoho zmíněného zástupce skupiny aldehydů a ketonů. Obě analýzy malinového destilátu v daném časovém rozmezí spojuje přítomnost benzaldehydu. V první analýze bylo v aromaprofilu detekováno 0,17 rel. % benzaldehydu, zatímco nyní došlo k nárůstu jeho množství až na 0,92 rel. %. S časovým odstupem byl v aromaprofilu identifikován benzofenon v množství 0,14 rel. %, který původní analýzou nebyl vůbec detekován. Významný rozdíl byl i v přítomnosti apokarotenoidů, které byly hojně identifikovány v aromaprofilu původního vzorku

(1,06 rel. % α -ionolu, 0,22 rel. % (*E*)- α -iononu, dále 3,4-dehydroionen, dihydro- β -ionon a dihydro- β -ionol, v zastoupení do 0,2 rel. %), avšak novou analýzou byl identifikován v množství 0,73 rel. % pouze jeden z nich, a to (*E*)- α -ionon. Z tohoto je patrné, že zastoupení (*E*)- α -ionon v aromaprofilu malinovice vzroslo o téměř 0,5 rel. %.

Poměrně velký rozdíl byl pozorován ve složení a zastoupení esterů v aromaprofilu malinového destilátu, neboť autor článku popisuje vysoký obsah esterů. Analýzou, která byla provedena nyní, však byl zjištěn značný pokles množství esterů v aromaprofilu v řádu jednotek relativních %. Z článku vyplývá, že největší podíl z esterů v této pálenice zaujímal bezesporu ethyl kaprinát (18,22 rel. %), jehož zastoupení po třech letech kleslo na 5,25 rel. %. Původní studie také poukazuje na relativní zastoupení 14,59 rel. % ethyl laurátu v aromaprofilu (nyní 0,82 rel. %), 6,34 rel. % ethyl kaprylátu (nyní 6,76 rel. %) a 1,71 rel. % ethyl kapronátu (nyní 3,79 rel. %). U zmíněných sloučenin, kromě ethyl kapronátu a ethyl kaprylátu, došlo k poklesu jejich množství v aromaprofilu, důsledkem stárnutí destilátu. V relativním zastoupení v rozmezí 2,8 – 3,9 rel. % byly v původním aromaprofilu nalezeny další estery, jako ethyl myristát (2,86 rel. %), fenethyl oktanoát (3,28 rel. %), ethyl palmitát (3,89 rel. %) a ethyl (*E*)-9-hexadekanoát (3,24 rel. %). Nynější analýzou byl zaznamenán pokles relativního zastoupení ethyl myristátu na 0,37 rel. % a fenethyl oktanoátu na 0,22 rel. % a nárůst relativního zastoupení ethyl palmitátu (6,12 rel. %). Ethyl (*E*)-9-hexadekanoát nebyl nynější analýzou malinovice v aromaprofilu identifikován.

V původní analýze této pálenky bylo z oxidovaných monoteprenů identifikováno 0,07 rel. % Bois de Rose oxidu a 0,12 rel. % linaloolu a α -terpineolu. Nynější analýza poukázala na přítomnost 0,35 rel. % linaloolu a 0,82 rel. % α -terpineolu, z čehož plyne nárůst relativního zastoupení oxidovaných monoteprenů (1,17 rel. %) v aromaprofilu malinovice. V případě oxidovaných seskviterpenů byla v původním aromaprofilu malinovice identifikována přítomnost 1,88 rel. % (*E*)-nerolidolu a 0,39 rel. % (*E*)-2,3-dihydrofarnesolu. Oproti tomu, analýzou pálenky po uskladnění nebyl v aromaprofilu identifikován žádný zástupce ze skupiny oxidovaných seskviterpenů. Žádný zástupce ze skupiny monoteprenů a seskviterpenů nebyl identifikován v aromaprofilu před ani po uskladnění.

Jediný fenolický derivát, a to 2,4-di-*tert*-butylfenol byl identifikován při analýze malinovice jak před uskladněním, tak i poté. Zajímavé je, že před uskladněním bylo relativní zastoupení této sloučeniny v aromaprofilu 0,6 rel. %, avšak po uskladnění zastoupení této sloučeniny vzrostlo na 42,77 rel. %. Největší měrou se na relativní zastoupení těkavých látek, které byly

v aromaprofilu identifikovány, podílel právě 2,4-di-*tert*-butylfenol. Pravděpodobnějším důvodem nárůstu zastoupení látek v aromaprofilu po uskladnění destilátu, je úbytek jiných sloučenin, než to, že by vzrostl jejich obsah v samotném destilátu. Mikroextrakce těkavých látek tuhou fází byla provedena na vlákně se stejným sorbentem za stejných extrakčních podmínek, stejně tak analýza těkavých látek proběhla za stejných chromatografických podmínek jako před třemi lety.

Z tohoto porovnání složení těkavých látek v tomtéž vzorku malinového destilátu při analýze za identických podmínek vyplývá, že v časovém horizontu uskladnění destilátu v uzavřené nádobce v temnu se mění podíly jednotlivých látek. Ve většině případů, došlo k poklesu zastoupení těkavých sloučenin v aromaprofilu destilátu v čase. Největší změnou v zastoupení jednotlivých sloučenin v aromaprofilu se vyznačují estery a fenolické deriváty. Relativní obsah některých esterů v aromaprofilu malinovice za dobu po uskladnění destilátu poklesl až sedmnáctinásobně, jiné estery přítomné v původním aromaprofilu dokonce nebyly vůbec identifikovány. V aromaprofilu malinovice byl před i po uskladnění identifikován fenolický derivát 2,4-di-*tert*-butylfenol, jehož zastoupení extrémně vzroslo po uskladnění destilátu z původních 0,6 rel. % na 42,77 rel. %. K nárůstu relativního zastoupení v aromaprofilu malinovice došlo i v případě ethyl kapronátu, ethyl kaprylátu, 2-fenylethanolu nebo benzaldehydu, jejichž zastoupení v aromaprofilu vzroslo, oproti původní analýze v rozmezí 0,42 až 2,07 rel. %. Nárůst zastoupení těkavých látek v aromaprofilu malinovice byl pozorován i u oxidovaných seskviterpenů, zejména linaloolu a α -terpineolu.

Změny ve složení aromaprofilu potvrdily očekávání, neboť podle výrobce nejsou destiláty malinového typu vhodné k dlouhodobému skladování, právě z důvodu mizejícího ovocného aroma. Na změnu těkavých látek či jejich koncentrace při zrání destilátu poukazuje i literatura [45, 46, 49]. Literatura uvádí, že zráním mohou některé druhy pálenek, jako např. malinová, ztrácet své typické aroma a chuť po původní surovině. Čemuž by nasvědčovalo i klesající zastoupení esterů a narůstající množství benzaldehydu v aromaprofilu malinovice, který zastiňuje původní ovocnou chuť. Dále je v literatuře diskutována možnost změny těkavých látek, v důsledku jejich vzájemné reakce na jiné produkty, např. esterifikace. Tyto mnohdy nežádoucí přeměny těkavých látek v čase mohou ovlivnit chuť, aroma i konzistenci produktů.

3.2 Rozlišení druhu ovocných destilátů na základě statistické analýzy profilu těkavých látek

Cílem této části diplomové práce bylo rozlišit jednodruhové ovocné destiláty na základě statistické analýzy chromatografických dat. Součástí tohoto experimentu bylo celkem 52 vzorků pálenek z jablek, hrušek, meruněk, slivoně mirabelky a švestek. Extrakce těkavých látek ze vzorku byla provedena pomocí mikroextrakce tuhou fází v headspace uspořádání (extrakční podmínky viz kapitola 2.2). Následně byly těkavé látky analyzovány pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační detekcí (chromatografické podmínky viz kapitola 2.3). Výstupem z chromatografické analýzy těkavých organických sloučenin byl chromatogram, z něhož byly získány retenční časy, resp. retenční indexy a k nim příslušné plochy píků pro jednotlivé složky ovocných destilátů. Statistické vyhodnocení těchto dat bylo provedeno pomocí ortogonální projekce do latentních struktur a také pomocí hierarchické analýzy shluků.

3.2.1 Ortogonální projekce do latentních struktur

Rozlišení jednodruhových ovocných pálenek bylo provedeno modelem ortogonální projekce do latentních struktur (OPLS), na základě predikce druhu použitého ovoce. Chromatografická data byla převedena na matici ($\mathbf{r} \times \mathbf{c}$), obsahující \mathbf{r} řad a \mathbf{c} sloupců. Řady označují druh ovocného destilátu a do sloupců (proměnné \mathbf{X} , tzv. prediktory) označeným retenčním indexem byly zadány příslušné plochy píků. Jako závisle proměnná (\mathbf{Y}) byl zvolen logaritmus poměru pravděpodobnosti, že daný vzorek je destilát daného druhu, k pravděpodobnosti, že vzorek není destilát daného druhu (Logarithm of the Likelihood Ratio, LLR). Výsledný OPLS model je přehled vztahů mezi závisle proměnnou \mathbf{Y} , resp. ovocným druhem destilátu, a vysvětlující náhodnou proměnnou \mathbf{X} , v tomto případě retenčními indexy látek vztažených k plochám píků jednotlivých látek v chromatogramu.

Upravená chromatografická data byla transformována, aby bylo dosaženo symetrické distribuce. S použitím multivariačního t -testu (Hotelling's T^2 statistics) a statistiky důležitosti proměnné (Variable Importance Statistics, VIP) došlo k oddělení nekorelovaných dat. Hotellingův t -test sloužil ke kontrole homogenity prediktorů, zatímco statistika VIP byla použita k testování relevance prediktorů. Následně byly pomocí statistického programu vypočteny parametry zátěže komponent pro jednotlivé proměnné, které sloužily k vyhodnocení vztahů mezi prediktory a druhem destilátu pro každou prediktivní komponentu (korelační koeficienty charakterizující vztahy mezi jednotlivými destiláty, resp. druhy

destilátů). Dále byly vypočteny koeficienty, které slouží k interpretaci vztahu mezi predikovanou proměnnou (LLR) a prediktory, resp. vysvětlují variabilitu mezi danou proměnnou a prediktory. Pro statistické výpočty byl údaj o ovocném druhu destilátu nahrazen pozorovanou (aktuální) hodnotou LLR. Pro všechna pozorování (testované vzorky) byly statistickým modelem vypočteny predikované hodnoty LLR. Dále byly modelem vypočteny hodnoty citlivosti a specifická predikce. K vyhodnocení vztahů mezi proměnnými byla nutná znalost velikosti vlivu jednotlivých znaků (druh ovocné pálenky) na danou komponentu (korelační koeficient). Korelační koeficienty neboli zátěže (tabulka 5) popisují, jak silně je závislá proměnná korelována s prediktory, resp. popisují korelační vztah mezi druhem destilátu a chromatografickými píky charakterizovaných plochou píku, a to pro každou prediktivní komponentu. Korelační koeficienty jsou uváděny v určitém intervalu spolehlivosti, jehož rozsah je v tabulce 5 pro ilustraci označen hvězdičkou. Interval spolehlivosti vyjadřuje oblast výskytu korelačního koeficientu pro daný druh ovocné pálenky a příslušnou komponentu s pravděpodobností 95 % a 99 %. Hvězdičky uvádí hladinu statistické významnosti * $p < 0,05$ či ** $p < 0,01$. Hodnoty vysvětlené variability mezi jednotlivými závislými proměnnými a prediktory jsou uvedeny v tabulce 6.

Tabulka 5: Charakterizace OPLS prediktivních komponent na základě korelačních koeficientů jednotlivých závisle proměnných pro jednotlivé komponenty.

| Komponenta | Závisle proměnná | Korelační koeficient | Spolehlivost | Vysvětlená variabilita |
|---|------------------|----------------------|--------------|------------------------|
| 1 | HRU_LL | 0,562 | ** | 25,6 % |
| | JAB_LL | 0,542 | ** | |
| | MERU_LL | -0,177 | | |
| | MIRA_LL | -0,130 | | |
| | ŠVE_LL | -0,783 | ** | |
| 2 | HRU_LL | 0,086 | | 23,4 % |
| | JAB_LL | -0,441 | ** | |
| | MERU_LL | 0,382 | | |
| | MIRA_LL | 0,746 | | |
| | ŠVE_LL | -0,521 | ** | |
| 3 | HRU_LL | -0,240 | | 21,5 % |
| | JAB_LL | 0,174 | | |
| | MERU_LL | 0,870 | ** | |
| | MIRA_LL | -0,432 | | |
| | ŠVE_LL | -0,209 | | |
| 4 | HRU_LL | 0,731 | ** | 22,2 % |
| | JAB_LL | -0,617 | ** | |
| | MERU_LL | 0,157 | | |
| | MIRA_LL | -0,368 | ** | |
| | ŠVE_LL | 0,204 | ** | |
| Celková variabilita vysvětlená modelem | | | | 92,7 % |

Tabulka 6: Hladiny variability mezi predikovanou proměnnou a prediktory vysvětlené OPLS modelem (celková variabilita vysvětlená modelem je 92,7 %).

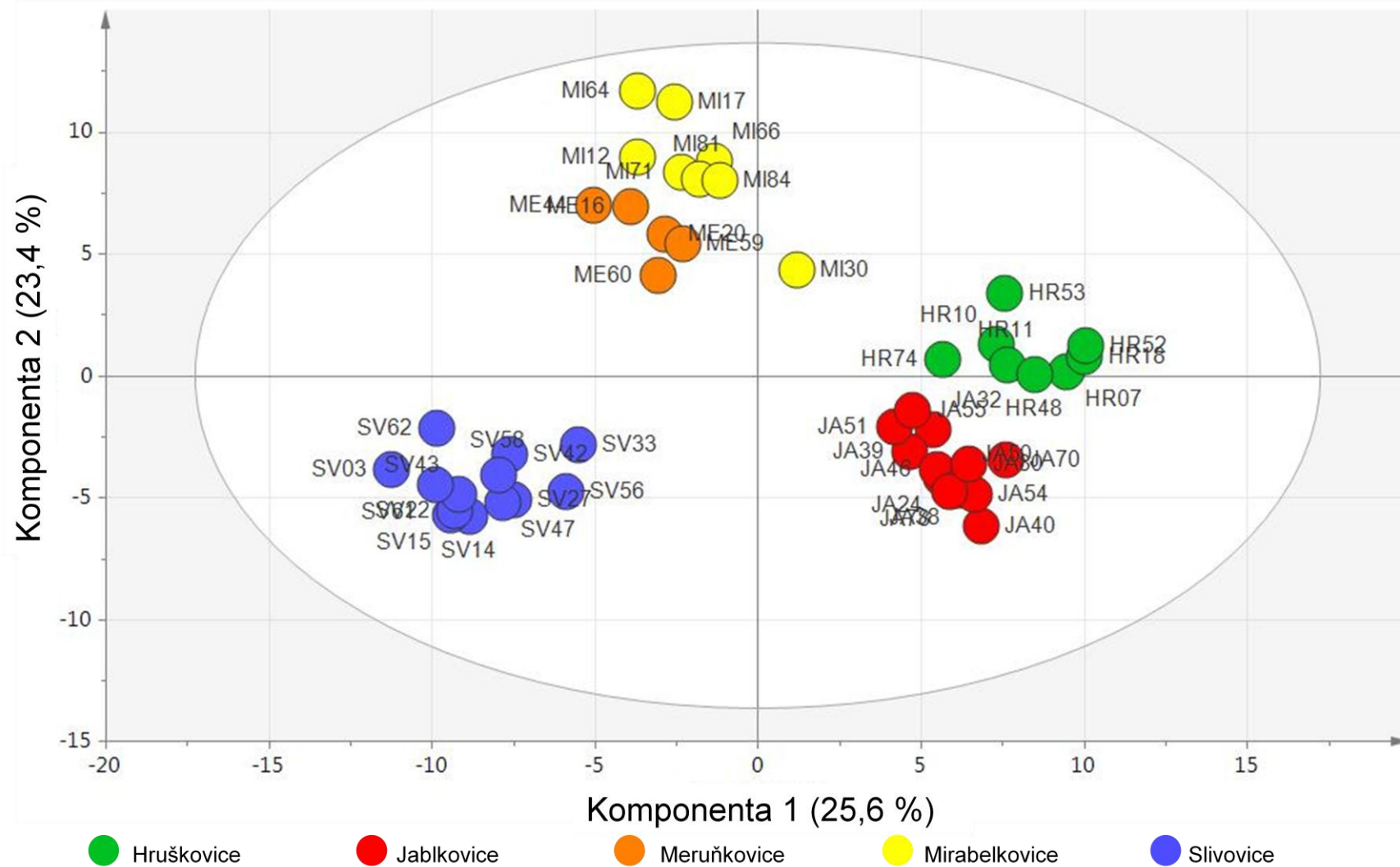
| Závisle proměnná | Vysvětlená variabilita mezi proměnnou a prediktory | Senzitivita (konfidenční interval 95 %) | Specificita (konfidenční interval 95 %) |
|------------------|--|---|---|
| HRU_LL | 91,5 % | 1,000 (0,676 – 1,000) | 1,000 (0,910 – 1,000) |
| JAB_LL | 89,9 % | 1,000 (0,772 – 1,000) | 1,000 (0,899 – 1,000) |
| MERU_LL | 95,8 % | 1,000 (0,566 – 1,000) | 1,000 (0,916 – 1,000) |
| MIRA_LL | 89,4 % | 1,000 (0,676 – 1,000) | 1,000 (0,910 – 1,000) |
| ŠVE_LL | 97,0 % | 1,000 (0,772 – 1,000) | 1,000 (0,899 – 1,000) |

Z hodnot korelačních koeficientů, uvedených v tabulce 5, vyplývá rozlišení druhů ovocných pálenek pomocí jednotlivých komponent. Modelem byly získány 4 komponenty, jejichž počet se odvíjí podle počtu závisle proměnných. Maximalizace rozdílu hodnot korelačních koeficientů pro daný ovocný druh destilátu v rámci jedné komponenty, vede k jejich nejlepšímu rozlišení. Každá komponenta vede k vzájemnému rozlišení jiných druhů ovocných destilátů. Na základě tohoto faktu, lze říci, že komponentou 1 byly nejlépe rozlišeny slivovice od hruškovic, případně jablkovic, kdežto komponenta 2 odděluje slivovice od mirabelkovic, s menším rozdílem korelačních koeficientů pak slivovice od meruňkovic. V rámci komponenty 3 došlo k úplnému rozlišení meruňkových pálenek od všech ostatních druhů. Komponentou 4 pak došlo k rozlišení pálenek z jádovin, respektive hruškových a jablečných pálenek.

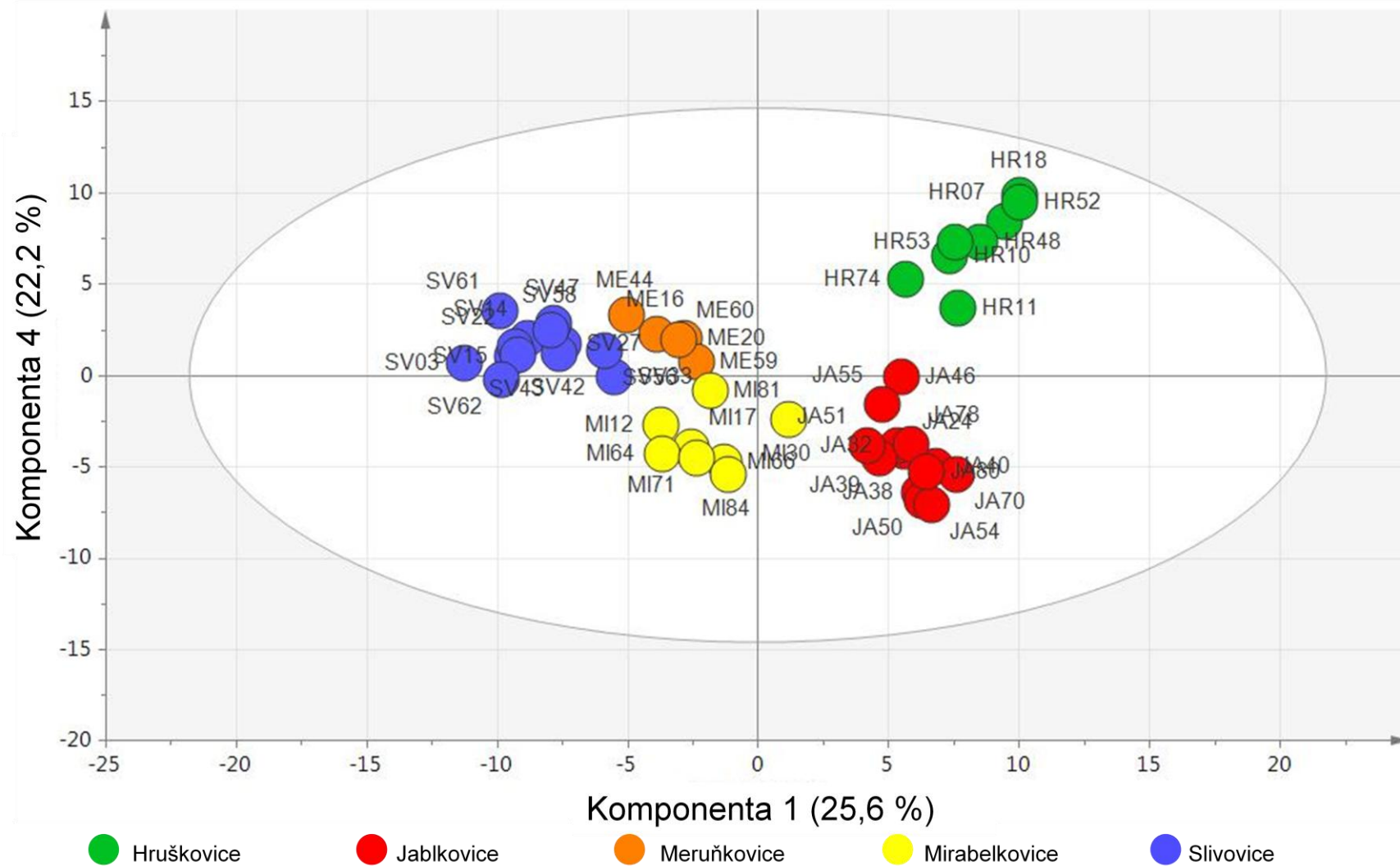
Pro lepší představu o rozlišení testovaných jednodruhových ovocných destilátů podle druhu ovoce jsou uvedeny grafy vzájemných závislostí jednotlivých komponent. Jasně rozlišení všech analyzovaných druhů pálenek je patrné z obrázků 9, 10 a 11. Vztah komponenty 1 a 2 uvádí obrázek 9. Položením komponenty 2 oproti komponentě 1 bylo získáno nejlepší rozlišení všech analyzovaných druhů ovocných destilátů. Základním poznatkem je vertikální rozlišení destilátů z peckovin a jádrového ovoce, tj. mirabelkovic, meruňkovic a slivovic oproti jablečným a hruškovým pálenkám. Z téhož obrázku je patrné, že v horizontální ose došlo k vzájemnému rozdělení destilátů z peckovin, a to slivovic (III. kvadrant) a destilátů z meruňek a mirabelek (II. kvadrant). Horizontálně byly taktéž vzájemně odděleny destiláty z jádovin, tedy hruškovice (I. kvadrant) od jablkovic (IV. kvadrant). Graf komponenty 4 oproti komponentě 1, zobrazený na obrázku 10, popisuje rozdělení destilátů z peckovin a z jádovin ve vertikální ose, ale taktéž horizontální rozlišení hruškovic (I. kvadrant) a jablkovic (IV. kvadrant). Z obrázku 11, na němž je zobrazena závislost komponenty 4

na komponentě 3, je patrné úplné odlišení meruňkovic (I. kvadrant) od všech ostatních destilátů (II – IV. kvadrant). Další varianty zobrazení rozložení jednotlivých vzorků vlivem dvou komponent jsou uvedeny na grafech v přílohách 1 až 3. Všechny tyto grafické závislosti rozlišují meruňkové pálenky od všech ostatních druhů. Příloha 1 zobrazuje vztah komponenty 3 vůči komponentě 1, které taktéž oddělují meruňkovice do II. kvadrantu od všech ostatních testovaných druhů ovocných destilátů. Rozlišení meruňkovic od všech ostatních druhů pálenek zobrazuje graf komponenty 3 oproti komponentě 2, který je uveden v příloze 2. Závislost komponenty 4 na komponentě 2, která je uveden v příloze 3, odlišuje horizontálně slivovice, meruňkovice a hruškovice od jablekovic a mirabelkovic. Dále v tomto případě došlo k rozlišení slivovic (II. kvadrant) od jablekovic (III. kvadrant) ve vertikální ose. Taktéž vertikálně jsou vzájemně rozlišeny hruškovice a meruňkovice (I. kvadrant) a mirabelkovice (IV. kvadrant).

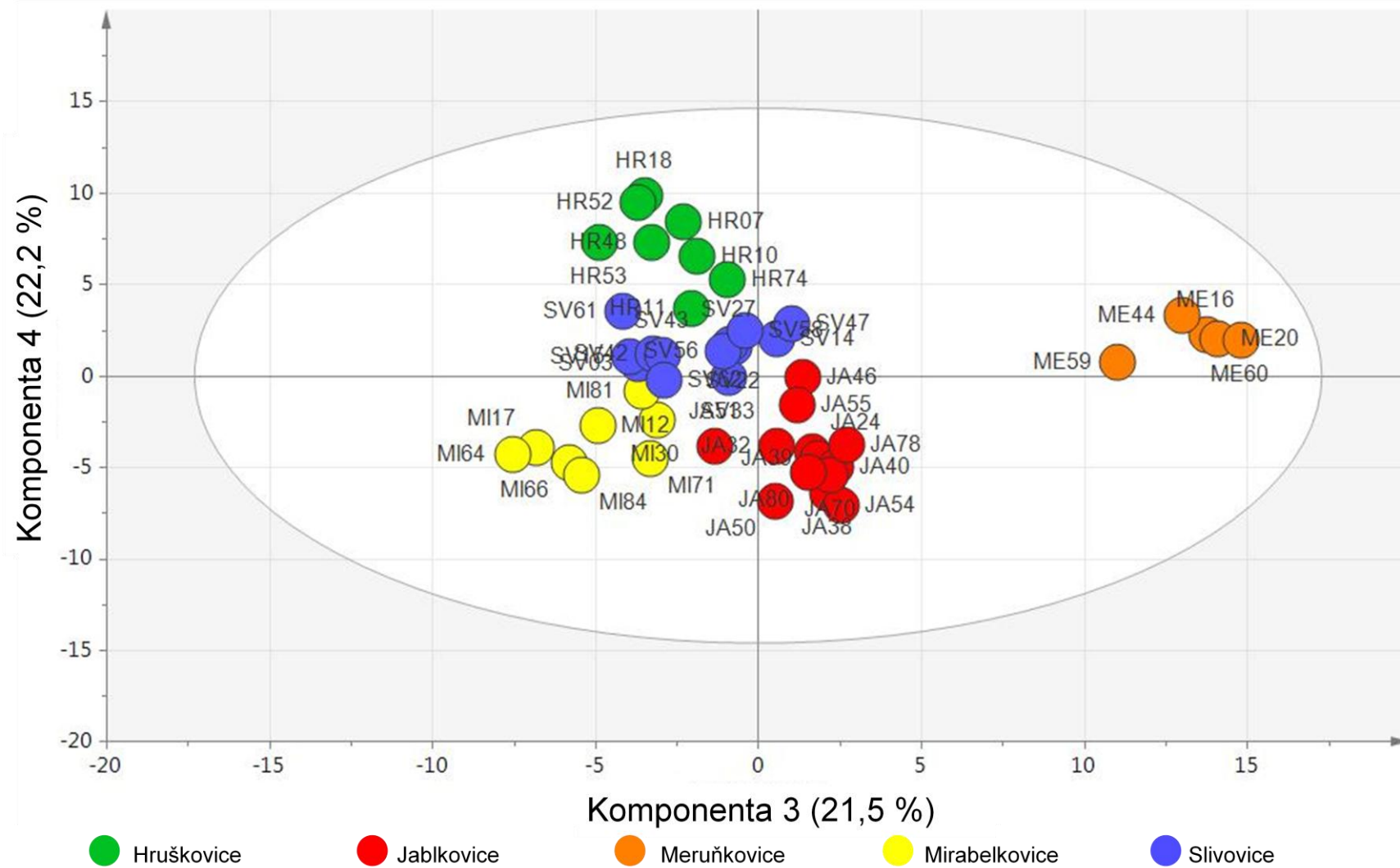
Podíl komponentami vysvětlených vztahů mezi jednotlivými druhy ovocných destilátů, k odlišení jejich druhu kvantifikuje hodnota modelem vysvětlené variability, která byla získána pro každou komponentu. Pomocí komponenty 1 bylo vysvětleno 25,6 % variability závisle proměnných, komponentou 2 pak 23,4 %. Pomocí komponenty 3 bylo vysvětleno 21,5 % a komponenta 4 přispěla k vysvětlení 22,2 % variability závisle proměnných. Model ortogonální projekce do latentních struktur tedy vysvětlil 92,7 % celkové variability, což je průměr variability vysvětlené jednotlivými proměnnými (viz tabulka 6).



Obrázek 9: Graf komponenty 2 v závislosti na komponentě 1, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce.



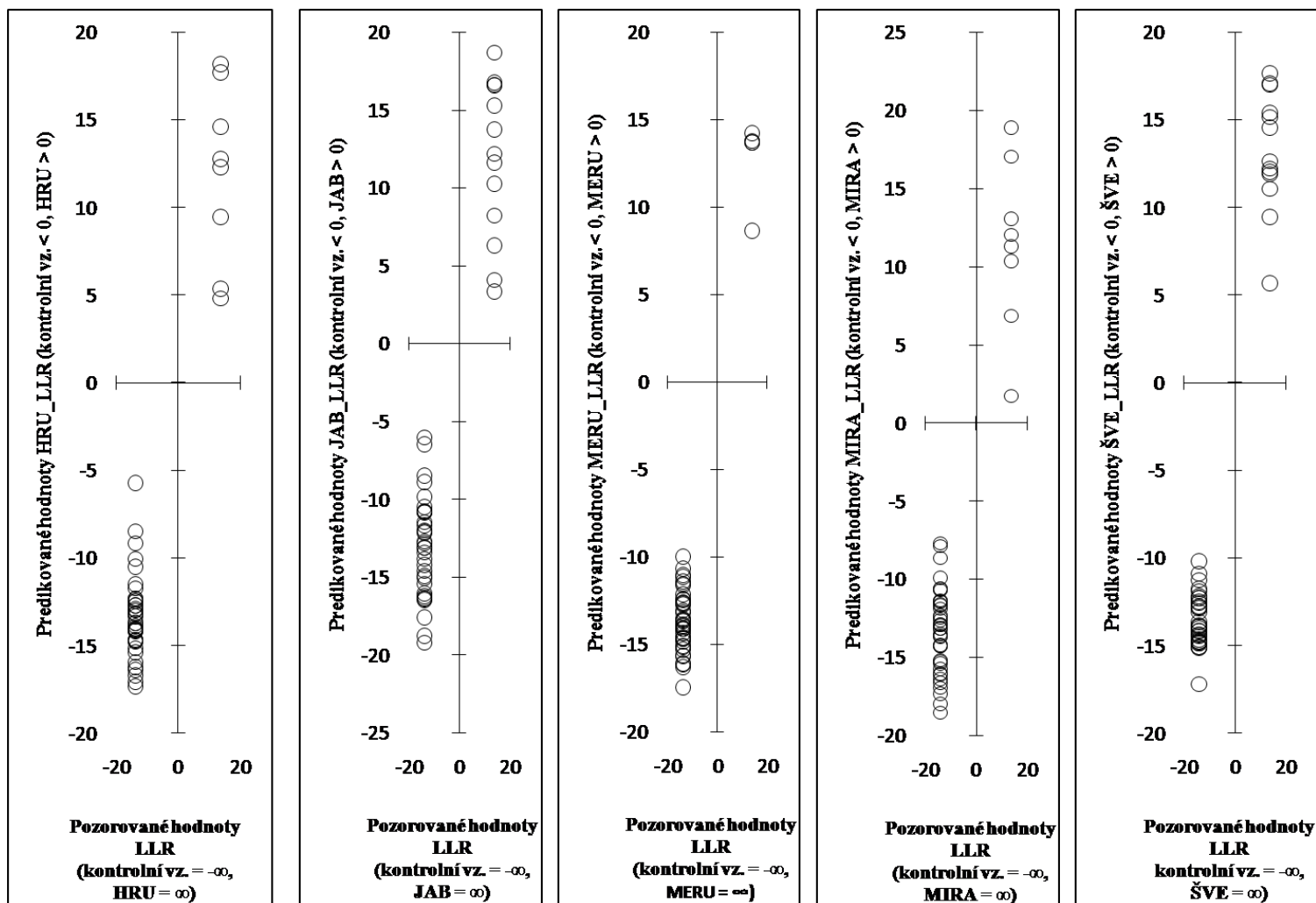
Obrázek 10: Graf komponenty 4 v závislosti na komponentě 1, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce.



Obrázek 11: Graf komponenty 4 v závislosti na komponentě 3, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce.

Použitý model OPLS dokázal od sebe odlišit všechny zmiňované ovocné pálenky, a to se 100% specificitou a senzitivitou. Senzitivita udává podíl správně predikovaných pozitivit u jednotlivých druhů destilátů. Specificitou se rozumí podíl správně predikovaných negativit pro ovocné druhy destilátů. Tyto skutečnosti jsou zobrazeny v grafech na obrázku 12, které byly získány testováním všech vzorků pracovního modelu na shodu s daným druhem destilátu, a to postupně pro jednotlivé druhy destilátů. Uvedené grafy popisují závislost predikovaných hodnot logaritmu pravděpodobnostního poměru na pozorovaných hodnotách, jinými slovy říkají, zda predikovaný druh ovocného destilátu odpovídá skutečnosti. Objekty, u kterých jsou obě hodnoty LLR (aktuální i predikovaná) kladné, byly modelem správně zařazeny jako destiláty, jejichž predikce odpovídá skutečnosti. V opačném případě (obě hodnoty LLR záporné) jsou to vzorky, které model správně vyhodnotil jako ty, které neodpovídají danému druhu destilátu (nazývané také jako kontrolní vzorky). Tuto skutečnost lze pozorovat na obrázku 12 u všech uvedených druhů destilátu. Pozorované objekty, které odpovídají predikci, leží v kvadrantu, kde jsou obě koordináty kladné, jinak řečeno souřadnice bodu jsou $[+, +]$. V opačném případě, objekty ležící v kvadrantu, kde jsou obě koordináty záporné $[-, -]$ poukazují na objekty patřící mezi ovocné druhy destilátů, které neodpovídají predikovanému druhu. Při pohledu na první graf zleva zobrazený na obrázku 12 je patrné, že z 8 analyzovaných hruškovic právě 8 vzorků odpovídá předpokladu, že se jedná o hruškový destilát (referenční standard i test jsou pozitivní). Zbývajících 39 objektů, které mají obě koordináty záporné, neodpovídá predikovanému druhu destilátu, což se shoduje se skutečností (referenční standard i test jsou negativní), a to se 100% specificitou a senzitivitou. Taktéž z 13 analyzovaných jablečných destilátů, vykazovalo 13 z nich pozitivní predikci a u zbylých 34 byla vyvrácena podobnost s jablečnými destiláty. Dále u pozorovaných 5 meruňkovic a 8 mirabelkovic byl potvrzen jejich původ ovocného druhu pomocí predikce OPLS modelu. V případě 13 analyzovaných slivovic bylo modelem predikováno 13 pozitivních a 34 negativních predikcí, a to taktéž s absolutní specificitou a senzitivitou. Z hodnot specificity a senzitivity pro každý objekt je patrné, že všechny pozitivní objekty byly modelem označeny jako pozitivní a naopak všechny negativní objekty model vyhodnotil jako negativní. Z toho vyplývá, že žádný z negativně hodnocených objektů model neoznačil jako falešně pozitivní. Jinak řečeno, původ všech jednodruhových destilátů model správně identifikoval a přiřadil je do společných skupin dle jejich druhu, mezi slivovice, mirabelkovice, meruňkovice, jablkovice a hruškovice.

S ohledem na uvedené výsledky je zjevné, že model ortogonální projekce do latentních struktur je schopen předpovědět, zda je původ ovocného destilátu stejný jak pěstitel či pálenice deklarují. Dále bylo potvrzeno, že chromatografická data (retenční indexy a plochy píků jednotlivých látek) získané metodou HS-SPME/GC-FID mohou být použity jako tzv. „fingerprint“ pro rozdělení testovaných destilátů podle druhu ovoce. To také poukazuje na to, že podmínky mikroextrakce tuhou fází i analýzy plynovou chromatografií byly zvoleny správně.



Obrázek 12: Závislost predikovaných hodnot LLR na pozorovaných hodnotách LLR, zleva pro: hruškovice, jablkovice, meruňkovice, mirabelkovice a slivovice (pracovní model).

3.3 Ověření správnosti metody OPLS k rozlišení druhu ovocných destilátů

Správnost predikce druhu ovocných destilátů na základě aromaprofilu těkavých látek pomocí navrženého modelu projekce do latentních struktur byla ověřena pomocí predikčního souboru dat. Pro pracovní model OPLS byl použit soubor dat 47 vzorků ovocných destilátů, jak je popsáno v předchozí kapitole 3.2. Do predikčního souboru byla zahrnuta data 5 vzorků (jedna hruškovice, dvě jablkovice, dvě slivovice), které nebyly zahrnuty do pracovního modelu, a taktéž soubor 11 vzorků méně obvyklých druhů pálenek, a to ořechovice, malinovice, bezinkovice, dýňovice, pampeliškovice, vínovice, dvě višňovice, mandlovice a destilát z žita a bezového květu. I přesto, že původ výše uvedených vzorků byl znám, byly tyto vzorky pro ověření predikce modelu označeny jako neznámé. Cílem bylo identifikovat původ vzorků z predikčního souboru a rozlišit jejich druhy na základě porovnání jejich profilů těkavých látek s jednodruhovými destiláty z pracovního modelu. Tím bylo ověřeno, zda navržený model ortogonální projekce do latentních struktur pracuje správně a lze ho tak použít pro predikci druhu ovocných destilátů opravdu neznámých vzorků.

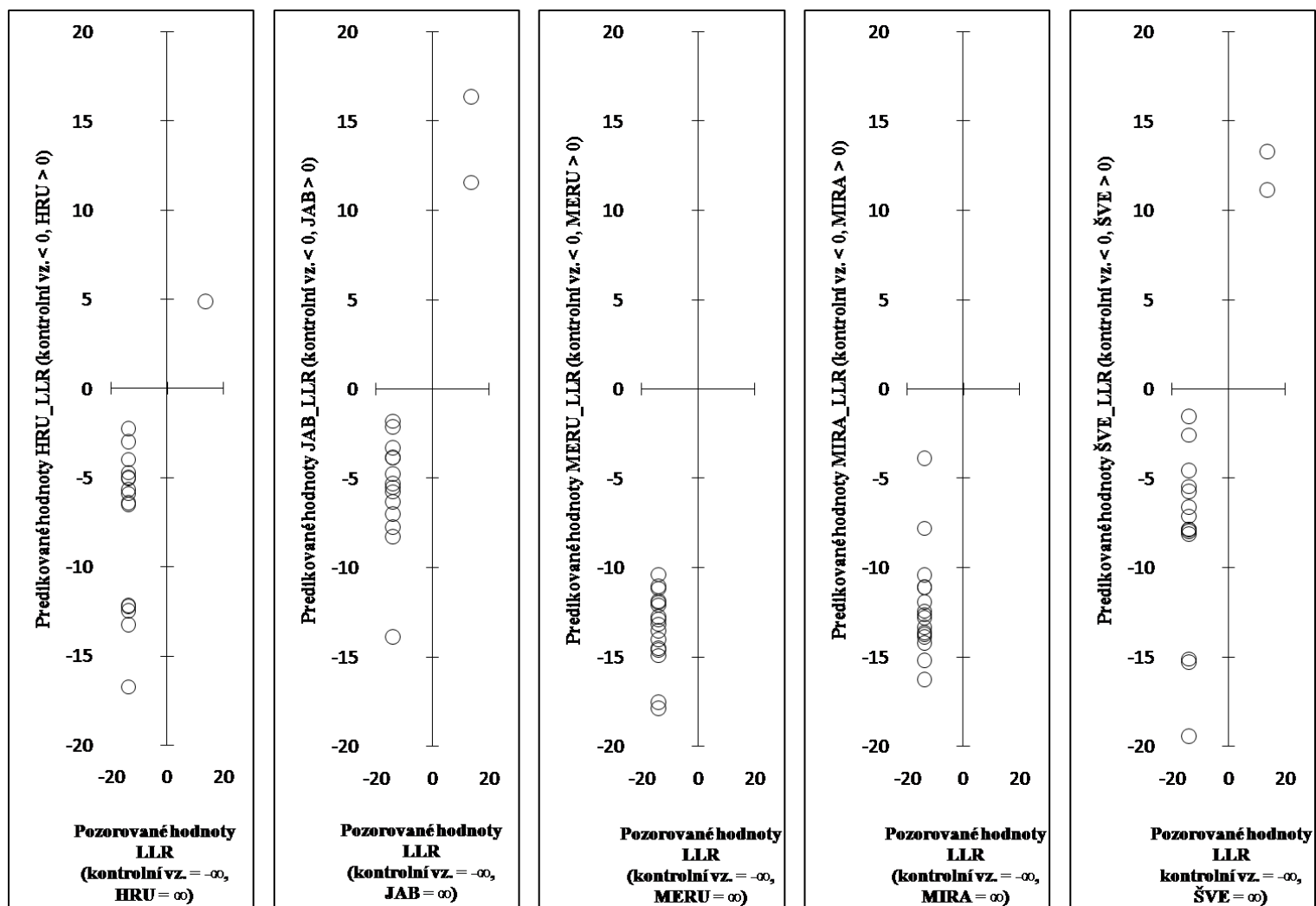
Tabulka uvedená v příloze 4, uvádí data predikovaných hodnot logaritmu pravděpodobnostního poměru, který vyjadřuje, zda daný neznámý vzorek patří do některé ze skupin ovocných destilátů z pracovního modelu. Při pohledu na predikované hodnoty LLR lze říci, které vzorky odpovídají aktuálně predikovanému druhu destilátu (záporné hodnoty LLR udávají, že vzorek nepatří do skupiny destilátů z daného ovoce, zatímco kladná hodnota LLR napovídá o shodě vzorku s danou skupinou ovocných destilátů). Například neznámý vzorek s označením HR 49 byl ve skutečnosti hruškový destilát, což podle jeho kladné hodnoty LLR pro predikci skupiny hruškových destilátů model opravdu potvrzuje. Stejně tak je to i u dvou jablečných pálenek (JA 37 a JA 65), jejich predikovaná hodnota LLR je opět kladná pro predikci skupiny jablečných destilátů. Totožného výsledku bylo dosaženo u dvou testovaných švestkových destilátů (SV 34 A SV57), které model na základě predikce ovocného druhu přiřadil ke skupině slivovic, což dokládají i údaje v tabulce, uvedené v příloze 4. V případě 11 speciálních destilátů model nepredikoval jejich příslušnost k žádné ze skupin destilátů z pracovního modelu, což znamená, že se nejednalo o vzorky jablečných, hruškových, meruňkových, mirabelkových ani švestkových destilátů. Tato informace predikovaná modelem se shoduje se skutečností, neboť se jednalo o vzorky např. ořechovice, pampeliškovice nebo dýňovice. To také poukazuje na fakt, že profily těkavých látek zmíněných 11 méně obvyklých druhů pálenek se neshodují, či nepodobají, profilu těkavých látek ani jednoho z 5 druhů testovaných destilátů. Pro lepší ilustraci byly vytvořeny grafy

závislosti predikovaných hodnot LLR na pozorovaných hodnotách LLR (pozorované hodnoty LLR byly zvoleny na základě znalosti druhu destilátu) a jsou uvedeny na obrázku 13. U těchto grafů platí stejné pravidlo, jako v případě vyhodnocení vzorků z pracovního souboru dat modelu OPLS a to, že pozorované objekty, které 100% odpovídají predikci, leží v kvadrantu, kde jsou obě koordináty kladné, resp. kolem souřadnic [+ , +] a naopak objekty mající záporné souřadnice bodů [- , -] poukazují na ostatní ovocné druhy pálenek.

Při pohledu na první graf na obrázku 13 je patrné, že predikční OPLS model predikoval přítomnost jedné positivity v případě hruškových destilátů z 15 testovaných vzorků. Jednalo se o pozitivní predikci neznámého vzorku HR 49, čímž došlo jednak k ověření, že daný vzorek je opravdu vyroben z hrušek a taktéž že model předpovídá správně i pro vzorky, které nebyly součástí pracovního (kalibračního modelu). Zbývajících 15 vzorků model vyhodnotil jako vzorky jiného druhu. Model dále vyhodnotil pozitivní predikci 2 neznámých vzorků jablkovic (JA 37 a JA 65), která odpovídá skutečnosti a také negativní shodu ostatních 14 destilátů s jablečnými. V případě meruňkových a mirabelkových destilátů model správně určil nepřítomnost žádného z vybraných vzorků, neboť meruňkové ani mirabelkové destiláty nebyly vůbec zahrnuty do predikčního souboru. V obou případech se všech 16 analyzovaných vzorků, resp. objektů pohybovalo v kvadrantu, kde jsou obě koordináty záporné, což indikuje negativní predikci daných druhů. Poslední graf z obrázku 13 zobrazuje závislost pozorovaných vs. predikovaných hodnot LLR náležící švestkovým pálenkám. Model správně predikoval přítomnost 2 švestkových destilátů, konkrétně neznámých vzorků SV 34 a SV57, což odpovídalo jejich předpokládanému původu. Zbýlých 14 vzorků model označil jako negativitu v testování na švestkové pálenky. Všechny zařazené speciální druhy pálenek predikční model přiřadil mezi vzorky neodpovídající ani jednomu druhu ovocných destilátů z pracovního modelu, proto jsou v grafech umístěné v oblasti záporných souřadnic [- , -].

OPLS model při předpovědi druhů neznámých vzorků ovocných destilátů vykazoval 100% specificitu a 100% senzitivitu, tudíž původ všech neznámých vzorků destilátů byl identifikován správně. OPLS model správně identifikoval 5 vzorků jednodruhových destilátů a všech 11 vzorků netradičních destilátů vyhodnotil jako objekty, nepřislušící k žádnému z uvedených druhů ovocných destilátů z pracovního modelu. Výsledkem tohoto ověření je fakt, že navržený OPLS model je schopen identifikovat i neznámé vzorky destilátů, a to na základě porovnání profilů těkavých látek neznámých vzorků se vzorky z pracovního modelu a správně říci, zda se jedná či nejedná o hruškovici, jablkovici, slivovici, meruňkovici

nebo mirabelkový destilát. Identifikace neznámých vzorků a jejich možné přiřazení ke zmíněným druhům modelem probíhalo s absolutní senzitivitou a specificitou.



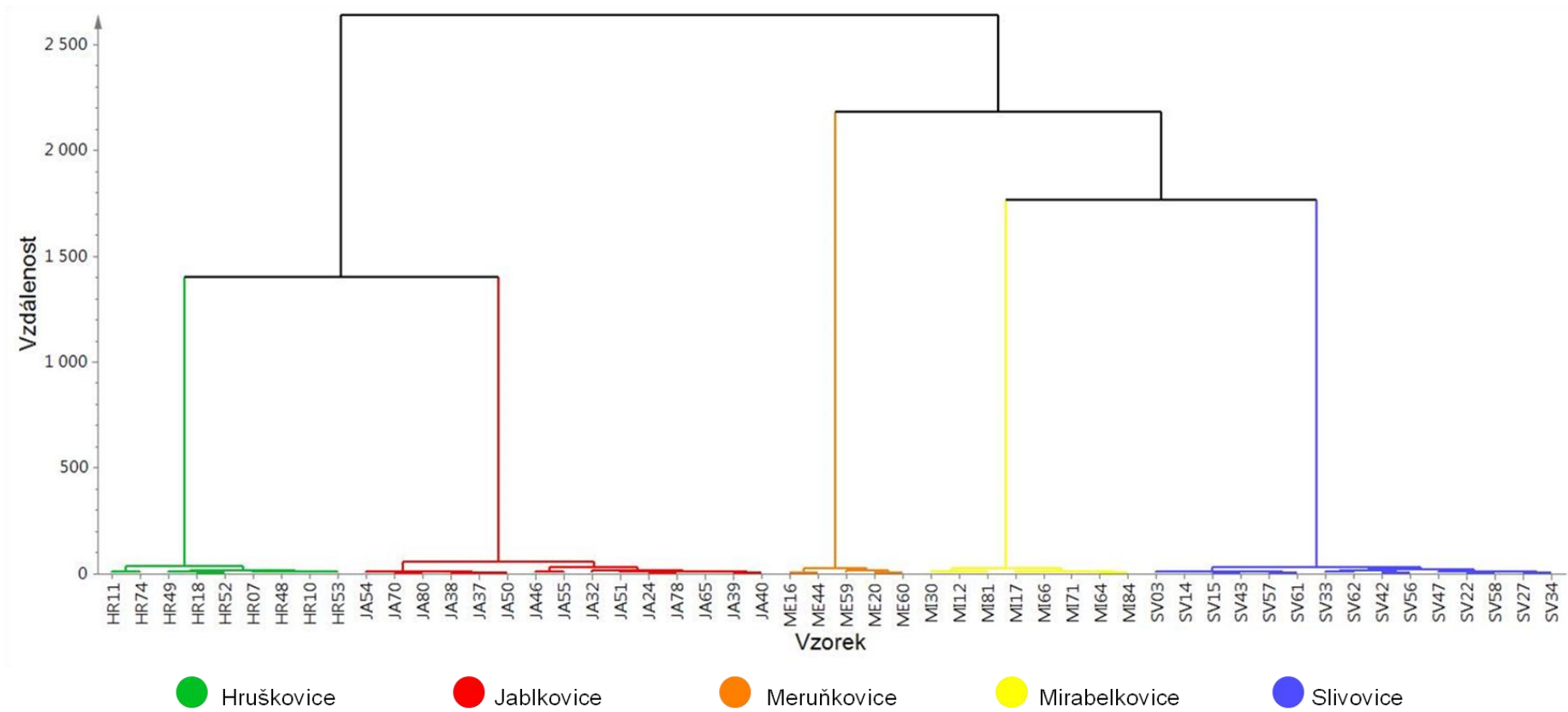
Obrázek 13: Závislost predikovaných hodnot LLR na pozorovaných hodnotách, zleva pro: hruškovice, jablkovice, meruňkovice, mirabelkovice a šlivovice (predikční soubor).

3.3.1 Hierarchická analýza shluků

Hierarchická analýza shluků (HCA) byla druhou statistickou metodou použitou pro vyhodnocení podobnosti profilů těkavých látek v testovaných ovocných destilátech. Do tohoto testování byla zahrnuta data z pracovního OPLS modelu i z predikčního souboru dat, tzn. 47 + 5 vzorků destilátů z hrušek, jablek, meruněk, slivoní mirabelek a švestek. HCA metoda pracuje se základním souborem dat po lineární transformaci, které klasifikuje do větších klastrů. Shlukování objektů do větších klastrů probíhalo na základě co největší podobnosti aromaprofilů mezi objekty v jednotlivých klastrech. Naopak do různých shluků byly rozřazovány objekty s co největším rozdílem profilů těkavých látek.

Výsledkem této statistické analýzy je dendrogram, jenž vizualizuje podobnosti profilů těkavých látek vzorků ovocných pálenek. Dendrogram, představující závislost hladiny pozorování na typu vzorku, je zobrazen na obrázku 14. Z tohoto dendrogramu je patrné, že soubor běžných druhů analyzovaných pálenek je logicky rozdělen na 2 větší shluky, a to na destiláty z peckovin a jádrovin, jejichž profily těkavých látek se od sebe nejvíce liší. Shluk destilátů z jádrovin se dále dělí na 2 menší podshluky, kde v prvním jsou zahrnuty hruškové a ve druhém jablečné pálenky. Shluk destilátů z peckovin je opět rozdělen na 2 menší podshluky, první tvoří meruňkové destiláty a druhý mirabelkové a švestkové destiláty. Všechny meruňkové destiláty jsou tedy zahrnuty v jednom samostatném podshluku. Podobnost aromaprofilů švestkových a mirabelkových destilátů odpovídá i druhové příslušnosti obou typů ovoce, jedná se o slivoň švestku (*Prunus domestica* L.) a její poddruh slivoň mirabelku (*Prunus domestica subsp. syriaca* Janch.)

Z výsledků HCA analýzy, které jsou vizualizovány v dendrogramu na obrázku 14, lze konstatovat, že tzv. „fingerprinty“ aromaprofilů těkavých látek obsažených v pálenkách z mirabelek a švestek jsou si částečně podobné, avšak liší se od profilu těkavých látek meruňkových pálenek. Zároveň profily těkavých látek švestkových a mirabelkových destilátů jsou natolik odlišné, že tyto dvě skupiny pálenek lze bezpečně rozeznat.



Obrázek 14: Dendrogram, podobnost profilů těkavých látek v ovocných destilátech.

4 ZÁVĚR

Cílem teoretické části diplomové práce bylo zpracování literární rešerše, týkající se problematiky alkoholických nápojů, zaměřené zejména na ovocné destiláty. V této části diplomové práce je schematicky uvedena klasifikace alkoholických nápojů. Diskutována byla také historie výroby alkoholických nápojů ve světě i v zemích střední Evropy. Citovány zde byly literární prameny popisující jednotlivé druhy světově vyráběných destilovaných alkoholických nápojů, jako např. whisky, gin, vodka, rum, tequila nebo brandy, vyráběných destilací fermentovaných přírodních materiálů, ať už rostlin, zemědělských plodin nebo ovoce. Většina teoretické části diplomové práce je věnována ovocným destilátům vyráběných hlavně v zemích střední a východní Evropy, kde mají dlouholetou tradici. Podrobně byl popsán celý proces výroby ovocných destilátů, včetně surovin, procesu fermentace a destilace, pracovních podmínek, finální úpravy destilátu a jeho skladování. Další část práce se zabývala vlastnostmi a složením ovocných destilátů a způsobem hodnocení jejich kvality. Ovocné destiláty jsou z pohledu složení, velmi složité směsi látek, které kromě ethanolu obsahují řadu těkavých organických sloučenin. Tyto těkavé sloučeniny jsou typické pro druh ovocného destilátu a definují jeho typické aroma a chuť. Teoretická část se dále zabývá problematikou extrakce a analýzy minoritních těkavých látek v ovocných destilátech. Rešerše je zaměřena na princip extrakčních technik a plynové chromatografie, jejich výhody a nevýhody a konkrétní příklady použití těchto technik v oblasti analýzy těkavých látek s odkazem na literární zdroje. Poslední pasáží je statistická analýza chromatografických dat, která se zabývá principem ortogonální projekce do latentních struktur a hierarchickou analýzou shluků, které byly využity v experimentální části této práce.

Cílem experimentální části diplomové práce bylo analyzovat aromaprofilu těkavých látek v jednodruhových ovocných a speciálních destilátech pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační a hmotnostní detekcí.

Záměrem analýzy profilů těkavých látek v jednodruhových destilátech (slivovice, mirabelkovice, meruňkovice, jablkovice a hruškovice) pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační detekcí, bylo rozlišení testovaných destilátů podle druhu ovoce, na základě statistické analýzy chromatografických dat. Statistickým nástrojem pro zmíněné rozlišení ovocných destilátů byla metoda ortogonální projekce do latentních struktur, která pracovala na základě predikce ovocného druhu destilátu. Pomocí OPLS metody byly analyzovány vztahy mezi ovocným druhem destilátu a chromatografickými daty (jednotlivé

píky v GC-FID chromatogramu charakterizované retenčním indexem a plochou píku, tzv. prediktory). Výsledkem OPLS metody bylo vyjádření korelačních vztahů mezi jednotlivými druhy ovocných destilátů a prediktory. Pomocí OPLS modelu byly vytvořeny čtyři prediktivní komponenty, z nichž každá popisuje zmíněné korelační vlivy. Interpretací jejich vzájemných vztahů bylo docíleno rozlišení testovaných ovocných destilátů podle druhu ovoce, ze kterého byly vyrobeny. Nejlepší rozlišení slivovic od hruškovic a jablkovic bylo získáno komponentou 1. Komponenta 2 nejlépe rozlišila slivovice od mirabelkovic a méně pak slivovice od meruňkovic. Pomocí komponenty 3 byly odlišeny meruňkovic od všech ostatních destilátů. Pomocí každé komponenty byl vysvětlen určitý podíl variability a jejich součet dal celkovou variabilitu vysvětlenou vytvořeným OPLS modelem, a to 92,7 %. Výsledkem analýzy bylo rozlišení všech analyzovaných druhů ovocných destilátů, a to se 100% specificitou a senzitivitou. To znamená, že model ortogonální projekce do latentních struktur je schopen na základě chromatografických dat rozlišit ovocné destiláty podle druhu ovoce. Zjevným výsledkem, který tento experiment přinesl, je potvrzení možnosti použití aromaprofilu těkavých látek jako „fingerprintu“ pro rozdělení ovocných destilátů podle druhu ovoce.

Správnost predikce pracovního modelu ortogonální projekce do latentních struktur byla ověřena na predikčním souboru 16 vzorků, který zahrnoval náhodně vybrané vzorky běžných ovocných destilátů a také skupinu speciálních destilátů, které byly pokládány za neznámé vzorky. Stejně jako v předchozím případě bylo všech 16 vzorků buď správně zařazeno do jedné z pěti tříd (slivovice, mirabelkovic, meruňkovic, jablkovic a hruškovice) nebo vyhodnoceny tak, že k žádné testované třídě destilátů nepatří. Ověřením bylo zjištěno, že navržený OPLS model pracuje správně a je schopen správně predikovat původ i skutečně neznámých vzorků destilátů na základě porovnání jejich profilů těkavých látek s daty v pracovním modelu.

Analýza podobnosti aromaprofilů těkavých látek destilátů z jablek, hrušek, meruňek, slivoní, mirabelek a švestek byla provedena pomocí hierarchické analýzy shluků. Shlukování objektů, resp. vzorků ovocných destilátů, do větších shluků probíhalo na základě podobnosti jejich aromaprofilů. Hlavním výstupem této analýzy je dendrogram, který graficky vizualizuje podobnosti mezi destiláty. HCA byl soubor analyzovaných ovocných destilátů rozdělen na destiláty z peckovin a jádrovin. Na další úrovni byly destiláty z jádrovin rozděleny na jablkovic a hruškovice a destiláty z peckovin na podshluk slivovic a meruňkovic s mirabelkovicemi. Až o úroveň níže byly destiláty z meruňkovic a mirabelkovic vzájemně

rozděleny. Z HCA analýzy vyplývá, že „fingerprinty“ aromaprofilů těkavých látek hruškových a jablečných destilátů, a také švestkových, mirabelkových a meruňkových jsou si navzájem podobné, ale lze je od sebe bezpečně rozeznat.

Cílem druhé experimentální části diplomové práce byla analýza těkavých látek ve speciálních, méně obvyklých druzích destilátů, a to konkrétně v ořechovici, malinovici, dýňovici, bezinkovici, vínovici, mandlovici, pampeliškovici, višňovicích a destilátu z bezového květu a žita. Analýzy těchto destilátů byly provedeny jak plynovou chromatografií s hmotnostní detekcí pro identifikaci těkavých látek v destilátech, tak i plynovou chromatografií s plamenově-ionizační detekcí. Ve všech analyzovaných vzorcích speciálních destilátů bylo identifikováno celkem 197 těkavých organických sloučenin. Destiláty byly vzájemně porovnávány jak z hlediska počtu a přítomnosti těkavých látek v aromaprofilech, tak i jejich množství, resp. relativního zastoupení v %. Vzhledem k tomu, že existuje velmi málo studií věnovaných analýze málo běžných druhů destilátů, přinesla tato práce velmi zajímavé a cenné poznatky.

Pro porovnání profilů těkavých látek v destilátech nebyla nalezena požadovaná literární data, proto bylo porovnání provedeno na základě přítomnosti těkavých látek v samotné surovině, extraktu nebo oleji. Porovnání ukázalo, že některé sloučeniny obsažené v surovině či extraktu byly identifikovány také v aromaprofilech testovaných destilátů. Množství a složení těkavých látek v daném destilátu závisí jak na druhu zvolené suroviny, tak na způsobu fermentace a podmínkách destilace. Z porovnání plyne, že některé látky přítomné v samotné surovině či extraktu, se mohou výrobou daného destilátu ztrácet, zatímco jiné detekované sloučeniny vznikají právě v důsledku fermentačních procesů, jako například estery. Stejně tak se množství těkavých látek v destilátech může měnit v závislosti na době zrání destilátu, což bylo dokázáno na vzorku malinovice. Stejný vzorek malinového destilátu byl za identických podmínek analyzován před 3 lety a jeho chemické složení bylo publikováno v článku **Bajer a kol.** [127]. Porovnáním složení těkavých látek v tomto časovém horizontu bylo zjištěno, že podíly jednotlivých těkavých sloučenin v aromaprofilu malinového destilátu se v čase mění. Množství většiny identifikovaných sloučenin v aromaprofilu v čase pokleslo, avšak k největšímu poklesu došlo v celkovém množství vyextrahovaných látek. Změny těkavých látek v destilátu, resp. jejich množství, v čase jsou popsány i v literatuře. V některých případech je uskladněním destilátu docíleno zjemnění chuti a zvýraznění ovocného aroma, jindy se však může zrání destilátu negativně projevat na jeho

senzorických vlastnostech, a to jak úbytkem aroma, tak např. v důsledku vzniku nežádoucích sloučenin, či jiných změn ve složení.

Závěrem lze konstatovat, že poznatky a výsledky této diplomové práce rozšiřují dosavadní publikované studie o výsledky analýzy aromaprofilu těkavých látek v netradičních druzích destilátů, zejména pak o porovnání s aromaprofilu surovin, olejů či extraktů. Dále jsou v této práci diskutovány změny v aromaprofilu malinového destilátu v čase, což potvrzuje, že složení a množství těkavých látek obsažených v destilátu se mění. Na základě analýzy profilů těkavých látek v jednodruhových destilátech bylo provedeno jejich rozlišení s využitím statistické metody ortogonální projekce do latentních struktur. Tím bylo ověřeno, že získané aromaprofilu těkavých látek mohou být využity jako tzv. „fingerprint“ pro rozdělení testovaných destilátů podle druhu ovoce. Správnost predikce OPLS metody byla ověřena na predikčním souboru dat s neznámými vzorky. Z výsledků tohoto experimentu vyplývá, že navržený statistický model rozliší testované druhy jednodruhových ovocných destilátů a na základě predikce druhu ovoce identifikuje, zda se jedná, nebo nejedná o deklarovaný druh destilátu.

5 POUŽITÁ LITERATURA

- [1] Blue, A.D.: *The complete book of spirits: a guide to their history, production, and enjoyment*. First edition ed. Harper Collins Publisher Inc., New York 2004.
- [2] Jílek, J. a J.A. Zentrich: *Příprava kvasu na výrobu slivovice (a ostatních pálenek)*. Výroba slivovice a její léčivé účinky. Dobra & FONTÁNA, Olomouc 1999.
- [3] Palmer, G.H.: *Beverages, Distilled*, v knize: *Reference module in food science*, 2016, Elsevier.
- [4] Buglass, A.J.: *Handbook of Alcoholic Beverages: technical, analytical and nutritional aspects*. John Wiley, Chichester, West Sussex, England 2011.
- [5] Wardencki, W.: *Alcoholic Beverages*, v knize: *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, 2018, Elsevier.
- [6] Seal, S. *Alcoholic Beverages/Types/Brands*. Dostupné z: <https://www.bngkolkata.com/web/alcoholic-beverages/>, staženo 11. 2. 2019.
- [7] Berger, R.G.: *Flavours and fragrances: chemistry, bioprocessing and sustainability*. New York: Springer, 2007.
- [8] Wiśniewska, P. a kol.: *Authentication of whisky due to its botanical origin and way of production by instrumental analysis and multivariate classification methods*. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and biomolecular spectroscopy* 173, 849-853 (2017).
- [9] Jack, F.R.: *Whiskies: composition, sensory properties and sensory analysis*, v knize: *Alcoholic Beverages*, 2012, Woodhead Publishing. str. 379-392.
- [10] Aylott, R.: *Whisky analysis*, v knize: *Whisky*, 2014, Academic Press: San Diego. str. 243-270.
- [11] *Regulation (EC) no. 110/2008 of the European Parliament and of the council of 15 January 2008 on the definition, description, presentation, labelling and the protection of geographical indications of spirit drinks and repealing council regulation (EEC) no. 1576/89*. Official Journal of the European Union.
- [12] Rhodes C. N. a kol.: *Gas chromatography carbon isotope ratio mass spectrometry applied to the detection of neutral alcohol in Scotch whisky: an internal reference approach*. *Food Chemistry* 114, 697–701 (2009).
- [13] Lea A. G. H. a J.R. Piggott: *Fermented beverage production*. Springer US, Dordrecht 2003.
- [14] Harrison, J. a N. Ridley: *Destiláty: objevte, poznejte a vychutnejte si nejkvalitnější lihoviny světa - od absintu a brandy až po vodku a whisky*. Slovart, Praha 2017.

- [15] Stupak, M. a kol.: *A novel approach to assess the quality and authenticity of Scotch Whisky based on gas chromatography coupled to high resolution mass spectrometry*. *Analytica Chimica Acta* 1042, 60-70 (2018).
- [16] Gibson, M. a P. Newsham: *Spirits*, v knize: *Food Science and the Culinary Arts*, 2018, Academic Press. str. 399-415.
- [17] Câmara, J.S. a kol.: *Comparative study of the whisky aroma profile based on headspace solid phase microextraction using different fibre coatings*. *Journal of Chromatography A* 1150 (1), 198-207 (2007).
- [18] Mcgee, H.: *On food and cooking: The science and lore of the kitchen*. Scribner, USA 2004.
- [19] Plutowska, B., P. Biernacka a W. Wardencki: *Identification of volatile compounds in raw spirits of different organoleptic quality*. *Journal of Institute of Brewing* 116, 433-439 (2010).
- [20] Lachenmeier, D.W. a kol.: *The use of ion chromatography to detect adulteration of vodka and rum*. *European Food Research and Technology* 218 (1), 105-110 (2003).
- [21] Riu-Aumatell, M.: *Gin*, v knize: *Encyclopedia of Food and Health*, 2016, Academic Press: Oxford. str. 222-226.
- [22] Riu-Aumatell, M.: *Gin: production and sensory properties*, v knize: *Alcoholic Beverages*, 2012, Woodhead Publishing. str. 267-280.
- [23] Ströhmer, G.: *Extraktfreie und extraktarme Spirituosen*, v knize: *Spirituosen-Technologie*, 2002, Behr's Verlag. str. 56-153.
- [24] Belmonte-Sánchez, J.R. a kol.: *Rum classification using fingerprinting analysis of volatile fraction by headspace solid phase microextraction coupled to gas chromatography-mass spectrometry*. *Talanta* 187, 348-356 (2018).
- [25] Pino, J.A.: *Characterization of rum using solid-phase microextraction with gas chromatography-mass spectrometry*. *Food Chemistry* 104 (1), 421-428 (2007).
- [26] Villanueva-Rodriguez, S. a H. Escalona-Buendia: *Tequila and mezcal: sensory attributes and sensory evaluation*, v knize: *Alcoholic Beverages*, 2012, Woodhead Publishing. str. 359-378.
- [27] Pérez-Caballero, G. a kol.: *Authentication of tequilas using pattern recognition and supervised classification*. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 94, 117-129 (2017).
- [28] Zhang, H., E.E. Woodams a Y.D. Hang: *Influence of pectinase treatment on fruit spirits from apple mash, juice and pomace*. *Process Biochemistry* 46 (10), 1909-1913 (2011).
- [29] Sádecká, J. a kol.: *Classification of plum spirit drinks by synchronous fluorescence spectroscopy*. *Food Chemistry* (2015).

- [30] López, F. a kol.: *Fruit Brandies*, v knize: *Science and Technology of Fruit Wine Production*, 2017, Elsevier. str. 531-556.
- [31] Śliwińska, M. a kol.: *The flavour of fruit spirits and fruit liqueurs: a review*. *Flavour and Fragrance Journal* 30 (3), 197-207 (2015).
- [32] Jakubíková, M., J. Sádecká a A. Kleinová: *On the use of the fluorescence, ultraviolet – visible and near infrared spectroscopy with chemometrics for the discrimination between plum brandies of different varietal origins*. *Food Chemistry* 239, 889-897 (2017).
- [33] Dixon, M. a E.C. Webb: *Enzymes*. Academic Press, London, UK 1979.
- [34] Postel, W. a L. Adam: *Distilled Beverage Flavour*. Harwood: Chichester, England 1989.
- [35] Tutass, R. a F. Beye: *Die genuine Aromastoffe von Cerasusavium und ihr Schicksal von der Frucht bis zum Destillat*. *Branntweinwirtschaft* 117, 349-355 (1977).
- [36] Adam, L. a W. Postel: *A new type of Kirschwasser?* *Branntweinwirtschaft* 132, 110-114 (1992).
- [37] Vyviurska, O. a kol.: *Volatile fingerprinting of the plum brandies produced from different fruit varieties*. *Journal of Food Science and Technology-Mysore* 54 (13), 4284-4301 (2017).
- [38] Tešević, V. a kol.: *Volatile components from old plum brandies*. *Food Technology and Biotechnology* 43 (4), 367-372 (2005).
- [39] Spaho N. a kol.: *Effects of distillation cut on the distribution of higher alcohols and esters in brandy produced from three plum varieties*. *Journal of the Institute of Brewing* 119, 48-56 (2013).
- [40] Nikicevic, N. a kol.: *The effects of the cherry variety on the chemical and sensorial characteristics of cherry brandy*. *Journal of the Serbian Chemical Society* 76 (9), 1219-1228 (2011).
- [41] Urosevic, I. a kol.: *Influence of yeast and nutrients on the quality of apricot brandy*. *Journal of the Serbian Chemical Society* 79 (10), 1223-1234 (2014).
- [42] Brandes, W., M. Karner a R. Eder: *Bestimmung von sortentypischen Aromastoffen in 'Williams Christ'-Bränden und deren Destillationsverhalten*. *Mitteilungen Klosterneuburg Rebe und Wein, Obstbau und Früchteverwertung* 53 (3-4), 103-112 (2003).
- [43] Milicevic, B. a kol.: *The influence of different pot still type on quality of Williams pear distillates*. *Tehnicki Vjesnik-Technical Gazette* 23 (4), 945-949 (2016).
- [44] Claus, M.J. a K.A. Berglund: *Fruit brandy production by batch column distillation with reflux*. *Journal of Food Process Engineering* 28 (1), 53-67 (2005).

- [45] Malleová, B. a H. Schmickl: *Domácí výroba lihovin*. Beta-Dobrovský, Praha 2010.
- [46] Uhrová, H.: *Domácí výroba slivovice a ostatních destilátů, ovocných šťáv, sirupů a vín*. Víkend, Líbeznice 2015.
- [47] Vondráček, O.: *Technologie kvasného průmyslu: výroba lihu a ušlechtilých pálenek z ovoce, výroba octa*. Česká společnost chemická, Praha 1945.
- [48] Balašík, J.: *Jak vypálit lepší slivovici*. Jaroslav Balašík, Ostrožská Nová Ves 2010.
- [49] Škopek, J.: *Výroba destilátů z vlastního ovoce*. Dona, České Budějovice 2003.
- [50] Kister, H.Z.: *Distillation Design*. McGraw-Hill, New York, USA 1992.
- [51] Kostik, V., S. Memeti a B. Bauer: *Gas-chromatographic analysis of some volatile congeners in different types of strong alcoholic fruit spirits*. Journal of Hygienic Engineering and Design 4, 98-102 (2013).
- [52] Stanis, M., E. Sapińska a K. Pielech-Przybylska: *Characteristics of contaminants present in raw spirits*. Zeszyty Naukowe Chemia Spozywcza i Biotechnologia 73, 105-121 (2009).
- [53] Wiśniewska, P. a kol.: *The analysis of raw spirits – a review of methodology*. Journal of Institute of Brewing 122 (1), 5-10 (2016).
- [54] Belitz, H., W. Grosch a P. Schieberle: *Food Chemistry*. Springer, New York, PA. 2009.
- [55] Jurečka, M.: *Bakalářská práce*. Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Zlín 2008.
- [56] Balík, J. *Ovocné destiláty*. Dostupné z: http://web2.mendelu.cz/af_291_projekty2/vseo/stranka.php?kod=8554, staženo 18. 4. 2019.
- [57] Sampaio, A. a kol.: *Production, chemical characterization, and sensory profile of a novel spirit elaborated from spent coffee ground*. LWT - Food Science and Technology 54 (2), 557-563 (2013).
- [58] Cardeal, Z. a P.J. Marriott: *Comprehensive two-dimensional gas chromatography: mass spectrometry analysis and comparison of volatile organic compounds in Brazilian cachaça and selected spirits* Food Chemistry 112(3) 747-755 (2009).
- [59] Morakul, S. a kol.: *A dynamic analysis of higher alcohol and ester release during winemaking fermentations*. Food and Bioprocess Technology 6(3), 818-827 (2012).
- [60] Nonato, E.A. a kol.: *A headspace solid-phase microextraction method for the determination of some secondary compounds of Brazilian sugar cane spirits by gas chromatography*. Journal of Agricultural and Food Chemistry 49 (3533-3539)(2001).

- [61] Ferreira, V. a kol.: *New and efficient microextraction solid-phase extraction method for the gas chromatographic analysis of wine volatiles*. Journal of Chromatography A, 731(1-2), 247-259 (1996).
- [62] Cabaroglu, T. a M. Yilmaztekin: *Methanol and major volatile compounds of turkish Raki and effect of distillate source*. Journal of the Institute of Brewing 117 (1), 98-105 (2011).
- [63] Zacaroni, L.M. a kol.: *Response surface optimization of SPME extraction conditions for the analysis of volatile compounds in Brazilian sugar cane spirits by HS-SPME/GC-MS*. Journal of the Institute of Brewing 123 (2), 226-231 (2017).
- [64] Berry, D.R. a J.C. Slaughter: *Alcoholic beverage fermentations*, v knize: *Fermented Beverage Production*, 2003: New York. str. 25-39.
- [65] Lachenmeier, D.W., U. Nerlich a T. Kuballa: *Automated determination of ethyl carbamate in stone-fruit spirits using headspace solid-phase microextraction and gas chromatography–tandem mass spectrometry*. Journal of Chromatography A 1108 (1), 116-120 (2006).
- [66] Lachenmeier, D.W., W. Frank a T. Kuballa: *Application of tandem mass spectrometry combined with gas chromatography to the routine analysis of ethyl carbamate in stone-fruit spirits*. Rapid Communications in Mass Spectrometry 19 (2), 108-112 (2005).
- [67] Al-Saidi, H.M. a A.A. Emará: *The recent developments in dispersive liquid–liquid microextraction for preconcentration and determination of inorganic analytes*. Journal of Saudi Chemical Society 18 (6), 745-761 (2014).
- [68] Ng, L.-K. a kol.: *Characterisation of commercial vodkas by solid-phase microextraction and gas chromatography/mass spectrometry analysis*. Journal of the Science of Food and Agriculture 70 (3), 380-388 (1996).
- [69] Coldea, T. a kol.: *Minor volatile compounds in traditional homemade fruit brandies from Transylvania-Romania, as determined by GC-MS analysis*. Notulae Botanicae Horti Agrobotanici Cluj-Napoca 42 (2), 530-537 (2014).
- [70] Yang, X. a T. Peppard: *Solid-phase microextraction for flavor analysis*. Journal of Agricultural and Food Chemistry 42 (9), 1925-1930 (1994).
- [71] Dean, J.R.: *Extraction techniques in analytical sciences*. Wiley, Northumbria University, Newcastle, UK 2009.
- [72] Costa Freitas, A.M., M.D.R. Gomes Da Silva a M.J. Cabrita: *Sampling techniques for the determination of volatile components in grape juice, wine and alcoholic beverages*, v knize: *Comprehensive Sampling and Sample Preparation*, 2012, Academic Press: Oxford. str. 27-41.

- [73] Perestrelo, R. a kol.: *Analytical characterization of the aroma of Tinta Negra Mole red wine: Identification of the main odorants compounds*. *Analytica Chimica Acta* 563 (1), 154-164 (2006).
- [74] Mihajilov-Krstev, T.M. a kol.: *Inferring the origin of rare fruit distillates from compositional data using multivariate statistical analyses and the identification of new flavour constituents*. *Journal of the Science of Food and Agriculture* 95 (6), 1217-1235 (2015).
- [75] Roberts, D.D., P. Pollien a C. Milo: *Solid-phase microextraction method development for headspace analysis of volatile flavor compounds*. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 48 (6), 2430-2437 (2000).
- [76] Procházková, D.: *Mikroextrakce na tuhou fázi a stanovení obsahu analytů*. *Chemické Listy* 96, 827–852 (2002).
- [77] Štěrbá, K., P. Dostálek a M. Karabín: *Moderní postupy využívané při přípravě vzorků pro stanovení alkoholů, esterů a kyselin v pivu*. *Chemické Listy* 105, 603-610 (2011).
- [78] Ledauphin, J. a kol.: *Differences in volatile compositions of French labeled brandies (Armagnac, Calvados, Cognac and Mirabelle) using GC-MS and PLS-DA*. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 58 (13), 7782-7793 (2010).
- [79] Da Porto, C. a kol.: *Analyses of orange spirit flavour by direct-injection gas chromatography–mass spectrometry and headspace solid-phase microextraction/GC-MS*. *Flavour and Fragrance Journal* 18 (1), 66-72 (2003).
- [80] Capobianco, M. a kol.: *Assessment of volatile organic compounds from banana Terra subjected to different alcoholic fermentation processes*. *Food Science and Technology* 36, 510-519 (2016).
- [81] García-Martín, S. a kol.: *Solid-phase microextraction gas chromatography–mass spectrometry (HS-SPME/GC–MS) determination of volatile compounds in orujo spirits: Multivariate chemometric characterisation*. *Food Chemistry* 118 (2), 456-461 (2010).
- [82] Delgado, R. a kol.: *Development of a stir bar sorptive extraction method coupled to gas chromatography-mass spectrometry for the analysis of volatile compounds in Sherry brandy*. *Analytica Chimica Acta* 672 (1), 130-136 (2010).
- [83] Guerrero, E.D. a kol.: *Stir bar sorptive extraction of volatile compounds in vinegar: Validation study and comparison with solid phase microextraction*. *Journal of Chromatography A* 1167 (1), 18-26 (2007).
- [84] Ibáñez, C. a J. Solá: *Optimisation of stir bar sorptive extraction (SBSE) for flavour analysis*. *Developments in Food Science* 43, 577-580 (2006).
- [85] Nogueira, J.M.F.: *Novel sorption-based methodologies for static microextraction analysis: A review on SBSE and related techniques*. *Analytica Chimica Acta* 757, 1-10 (2012).

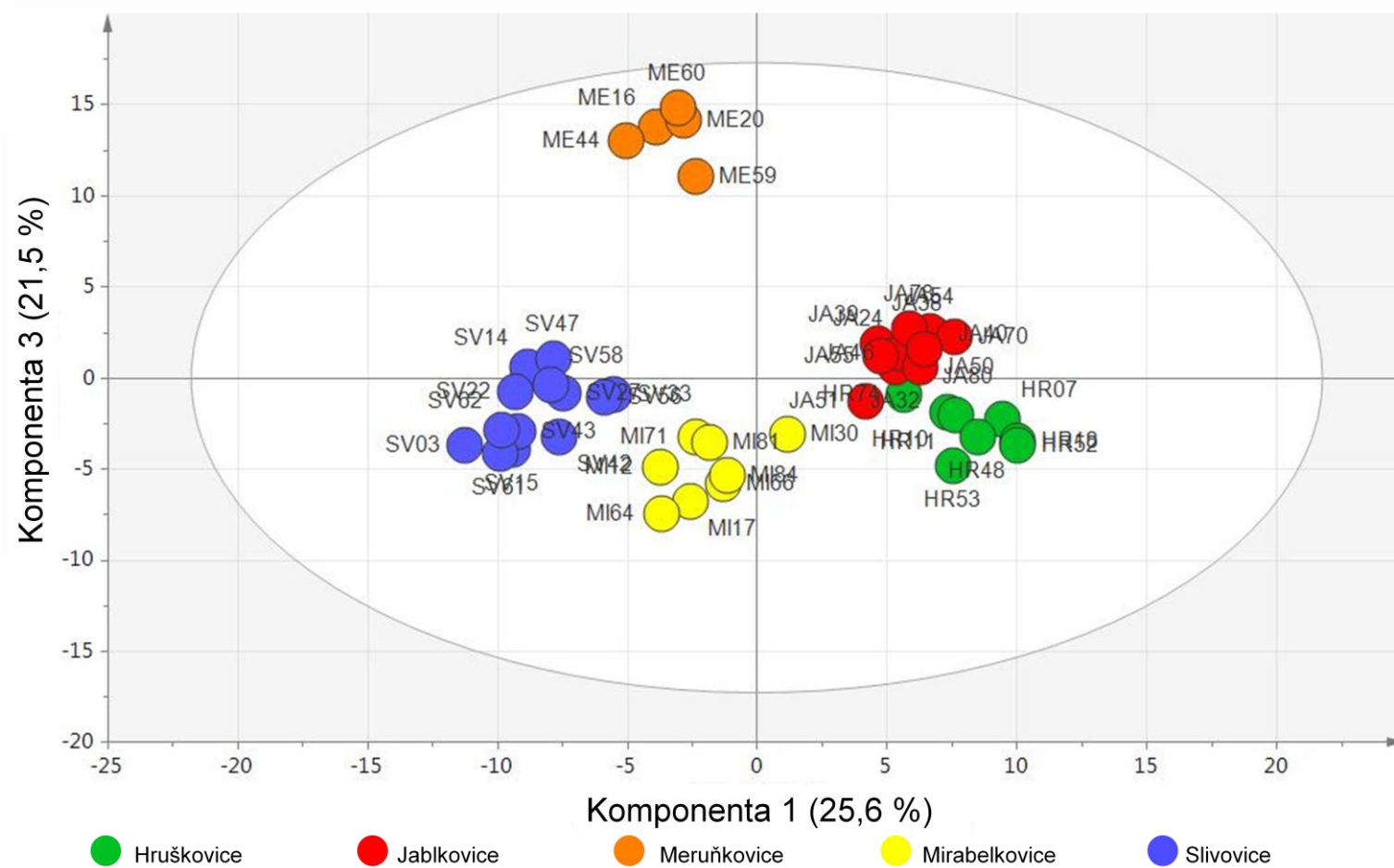
- [86] Zhou, Q., Y. Qian a M.C. Qian: *Analysis of volatile phenols in alcoholic beverage by ethylene glycol-polydimethylsiloxane based stir bar sorptive extraction and gas chromatography–mass spectrometry*. *Journal of Chromatography A* 1390, 22-27 (2015).
- [87] Kawaguchi, M. a kol.: *Applications of stir-bar sorptive extraction to food analysis*. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 45, 280-293 (2013).
- [88] Alves, R.F., A.M.D. Nascimento a J.M.F. Nogueira: *Characterization of the aroma profile of Madeira wine by sorptive extraction techniques*. *Analytica Chimica Acta* 546 (1), 11-21 (2005).
- [89] He, M., B. Chen a B. Hu: *Recent developments in stir bar sorptive extraction*. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 406 (8), 2001-2026 (2014).
- [90] Guerrero, E.D. a kol.: *Optimisation of stir bar sorptive extraction applied to the determination of volatile compounds in vinegars*. *Journal of Chromatography A* 1104 (1), 47-53 (2006).
- [91] Diez J. a kol.: *Optimisation of stir bar sorptive extraction for the analysis of volatile phenols in wines*. *Journal of Chromatography A* 1025, 263–267 (2004).
- [92] Campillo, N. a kol.: *Food and beverage applications of liquid-phase microextraction*. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 109, 116-123 (2018).
- [93] Shrivvas, K. a H.-F. Wu: *Rapid determination of caffeine in one drop of beverages and foods using drop-to-drop solvent microextraction with gas chromatography/mass spectrometry*. *Journal of Chromatography A* 1170 (1), 9-14 (2007).
- [94] Hashemi, M., A. Habibi a N. Jahanshahi: *Determination of cyclamate in artificial sweeteners and beverages using headspace single-drop microextraction and gas chromatography flame-ionisation detection*. *Food Chemistry* 124 (3), 1258-1263 (2011).
- [95] Šrámková, I. a kol.: *Automated in-syringe single-drop head-space micro-extraction applied to the determination of ethanol in wine samples*. *Analytica Chimica Acta* 828, 53-60 (2014).
- [96] Horák, T. a kol.: *Možnosti využití moderních metod přípravy vzorků pro plynově chromatografické analýzy při analýze nápojů a zejména piva. Část 3. - Mikroextrakce na pevné fázi a extrakce na míchací tyčince při analýze mastných kyselin v pivu*. *Kvasný Průmysl* 56, 418-422 (2010).
- [97] Kokosa, J.M.: *Advances in solvent-microextraction techniques*. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 43, 2-13 (2013).
- [98] Xiao, Q. a kol.: *Comparison of headspace and direct single-drop microextraction and headspace solid-phase microextraction for the measurement of volatile sulfur compounds in beer and beverage by gas chromatography with flame photometric detection*. *Journal of Chromatography A* 1125 (1), 133-137 (2006).

- [99] Wardencki, W.: *Application of single drop extraction (SDE) gas chromatography method for the determination of carbonyl compounds in spirits and vodkas au - curyło, janusz*. Analytical Letters 39 (13), 2629-2642 (2006).
- [100] Heymann, H. a S.E. Ebeler: *Instrumental analyses for alcoholic beverages*, v knize: *Sensory and Instrumental Evaluation of Alcoholic Beverages*, 2017, Academic Press: San Diego. str. 106-132.
- [101] Smith, R.M.: *Gas and liquid chromatography in analytical chemistry*. Wiley, New York 1988.
- [102] Holzbecher, Z. a J. Churáček: *Analytická chemie*. SNTL, Nakladatelství technické literatury, Praha 1987.
- [103] Hu, C. a kol.: *Determination of essential oil composition from osmanthus fragrans tea by GC-MS combined with a chemometric resolution method*. Molecules 15 (5), 3683-3693 (2010).
- [104] Ziółkowska, A. a H.H. Jeleń: *Differentiation of raw spirits of rye, corn and potato using chromatographic profiles of volatile compounds*. Journal of the Science of Food and Agriculture 92 (13), 2630-2637 (2012).
- [105] Satora, P. a kol.: *Chemical profile of spirits obtained by spontaneous fermentation of different varieties of plum fruits*. European Food Research and Technology 243, 489-499 (2017).
- [106] Rodríguez, R. a kol.: *Production method and varietal source influence the volatile profiles of spirits prepared from fig fruits (Ficus carica L.)*. European Food Research and Technology 244, 2213-2229 (2018).
- [107] Capobianco, M. a kol.: *Identification of aroma-active volatiles in banana Terra spirit using multidimensional gas chromatography with simultaneous mass spectrometry and olfactometry detection*. Journal of Chromatography A 1388, 227-235 (2015).
- [108] Plutowska, B. a W. Wardencki: *Gas chromatography-olfactometry of alcoholic beverages*, v knize: *Alcoholic Beverages*, 2012, Woodhead Publishing. str. 101-130.
- [109] Šístková, I. a kol.: *Identifikace sensoricky aktivních látek minerálních vod s citronovou příchutí pomocí plynové chromatografie s olfaktometrickým detektorem*. Chemické Listy 111, 343-348 (2017).
- [110] Buettner, A. a F. Welle: *Intra-oral detection of potent odorants using a modified stir-bar sorptive extraction system in combination with HRGC-O, known as the buccal odour screening system (BOSS)*. Flavour and Fragrance Journal 19 (6), 505-514 (2004).
- [111] Escudero, A., J. Cacho a V. Ferreira: *Isolation and identification of odorants generated in wine during its oxidation: a gas chromatography-olfactometric study*. European Food Research and Technology 211 (2), 105-110 (2000).

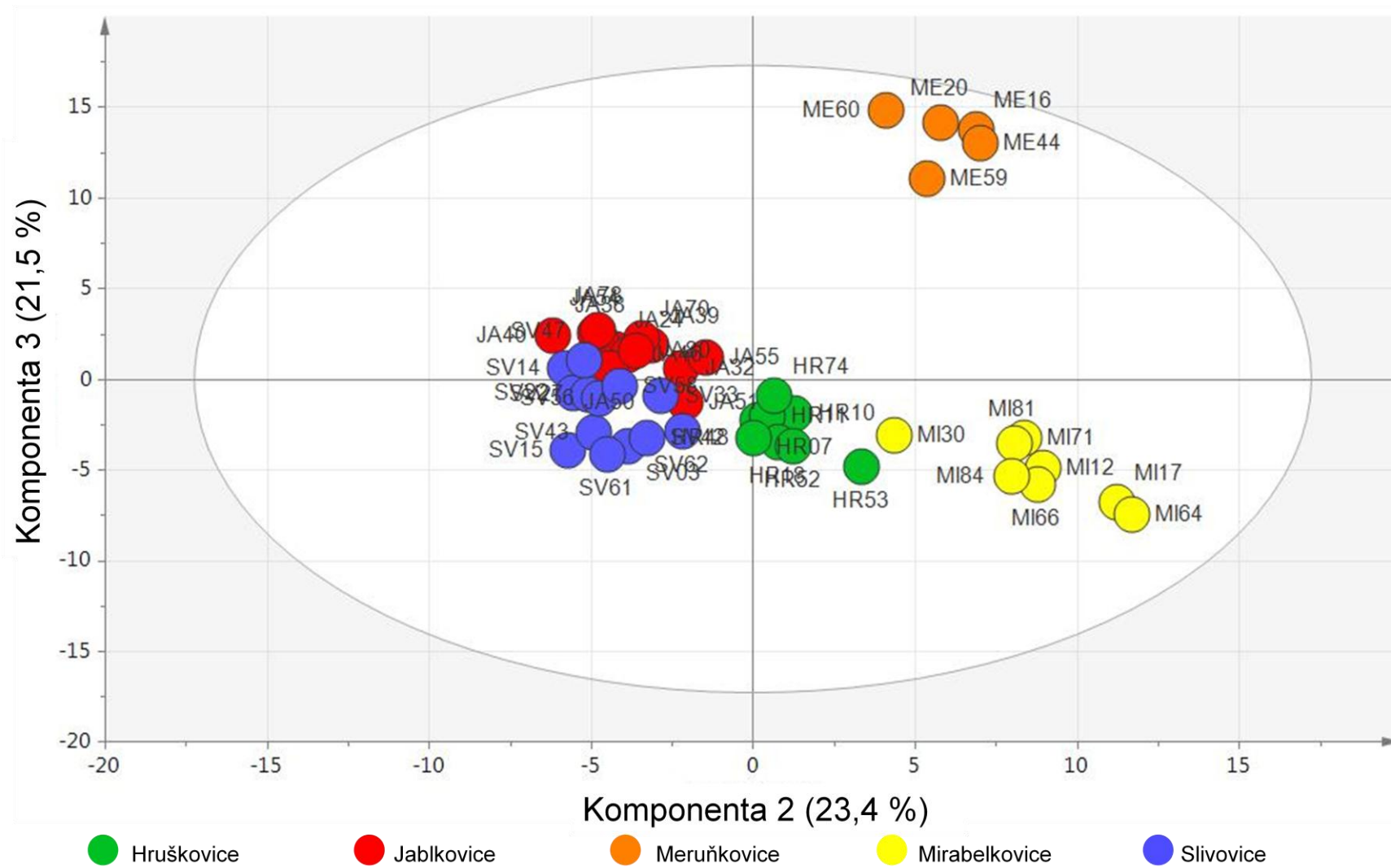
- [112] De Souza, M.D.C.A. a kol.: *Characterization of Cachaça and Rum aroma*. Journal of Agricultural and Food Chemistry 54 (2), 485-488 (2006).
- [113] Corsini, L. a kol.: *Characterization by gas chromatography-olfactometry of the most odour-active compounds in Italian balsamic vinegars with geographical indication*. Food Chemistry 272, 702-708 (2019).
- [114] Trygg, J. a S. Wold: *Orthogonal projections to latent structures (O-PLS)*. Journal of Chemometrics 16 (3), 119-128 (2002).
- [115] Pařízek, A. a kol.: *A comprehensive evaluation of steroid metabolism in women with intrahepatic cholestasis of pregnancy*. PLOS ONE 11, 1-24 (2016).
- [116] Hill, M. a kol.: *Effects of valproate and carbamazepine monotherapy on neuroactive steroids, their precursors and metabolites in adult men with epilepsy*. The Journal of Steroid Biochemistry and Molecular Biology 122 (4), 239-252 (2010).
- [117] Pytela, O.: *Chemometrie pro organické chemiky*. Univerzita Pardubice, Pardubice 2003.
- [118] Surowiec, I. a kol.: *Quantification of run order effect on chromatography - mass spectrometry profiling data*. Journal of Chromatography A 1568, 229-234 (2018).
- [119] Bylesjö, M. a kol.: *OPLS discriminant analysis: combining the strengths of PLS-DA and SIMCA classification*. Journal of Chemometrics 20 (8-10), 341-351 (2006).
- [120] Eriksson, L., J. Trygg a S. Wold: *CV-ANOVA for significance testing of PLS and OPLS models*. Journal of Chemometrics 22 (11-12), 594-600 (2008).
- [121] Hill, M., *Statistické vyhodnocení velkého souboru dat v hmotnostní spektrometrii*. 2008.
- [122] Yang, J., E. Grunsky a Q. Cheng: *A novel hierarchical clustering analysis method based on Kullback–Leibler divergence and application on dalaimiao geochemical exploration data*. Computers & Geosciences 123, 10-19 (2019).
- [123] Mokrý, J.: *Bakalářská práce*. Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc 2011.
- [124] Meloun, M. a J. Militký: *Kompendium statistického zpracování dat: metody a řešené úlohy*. Academia, Praha 2006.
- [125] Rosati, S. a kol.: *Muscle activation patterns during gait: A hierarchical clustering analysis*. Biomedical Signal Processing and Control 31, 463-469 (2017).
- [126] Caesar, L.K., O.M. Kvalheim a N.B. Cech: *Hierarchical cluster analysis of technical replicates to identify interferences in untargeted mass spectrometry metabolomics*. Analytica Chimica Acta 1021, 69-77 (2018).

- [127] Bajer, T. a kol.: *Chemical profiling of volatile compounds of various home-made fruit spirits using headspace solid-phase microextraction*. Journal of the Institute of Brewing 123 (1), 105-112 (2017).
- [128] Bajer, T., P. Bajerová a K. Ventura: *Effect of harvest and drying on composition of volatile profile of elderflowers (Sambucus nigra) from Wild*. Natural Product Communications 12, 1937-1942 (2017).
- [129] Caja, M.M. a kol.: *Analysis of volatile compounds in edible oils using simultaneous distillation-solvent extraction and direct coupling of liquid chromatography with gas chromatography*. European Food Research and Technology 211 (1), 45-51 (2000).
- [130] Duymus Agalar, H., B. Demirci a K.H.C. Baser: *The volatile compounds of Elderberries (Sambucus nigra L.)*. Natural Volatiles and Essential Oils 1, 51-54 (2014).
- [131] Salvador, Â.C., A.J.D. Silvestre a S.M. Rocha: *Unveiling elderflowers (Sambucus nigra L.) volatile terpenic and norisoprenoids profile: Effects of different postharvest conditions*. Food Chemistry 229, 276-285 (2017).
- [132] Al-Jabri, N.N. a M.A. Hossain: *Chemical composition and antimicrobial potency of locally grown lemon essential oil against selected bacterial strains*. Journal of King Saud University - Science 30 (1), 14-20 (2018).
- [133] Mitra, P., H.S. Ramaswamy a K.S. Chang: *Pumpkin (Cucurbita maxima) seed oil extraction using supercritical carbon dioxide and physicochemical properties of the oil*. Journal of Food Engineering 95 (1), 208-213 (2009).
- [134] Ibáñez, E. a kol.: *Analysis of volatile fruit components by headspace solid-phase microextraction*. Food Chemistry 63 (2), 281-286 (1998).
- [135] Ivanov, I. a kol.: *GC-MS characterization of n-hexane soluble fraction from dandelion (Taraxacum officinale Weber ex F.H. Wigg.) aerial parts and its antioxidant and antimicrobial properties*. Zeitschrift für Naturforschung C 73 (1-2), 41-47 (2018).
- [136] Ebeler, S.E., M.B. Terrien a C.E. Butzke: *Analysis of brandy aroma by solid-phase microextraction and liquid-liquid extraction*. Journal of the Science of Food and Agriculture 80 (5), 625-630 (2000).

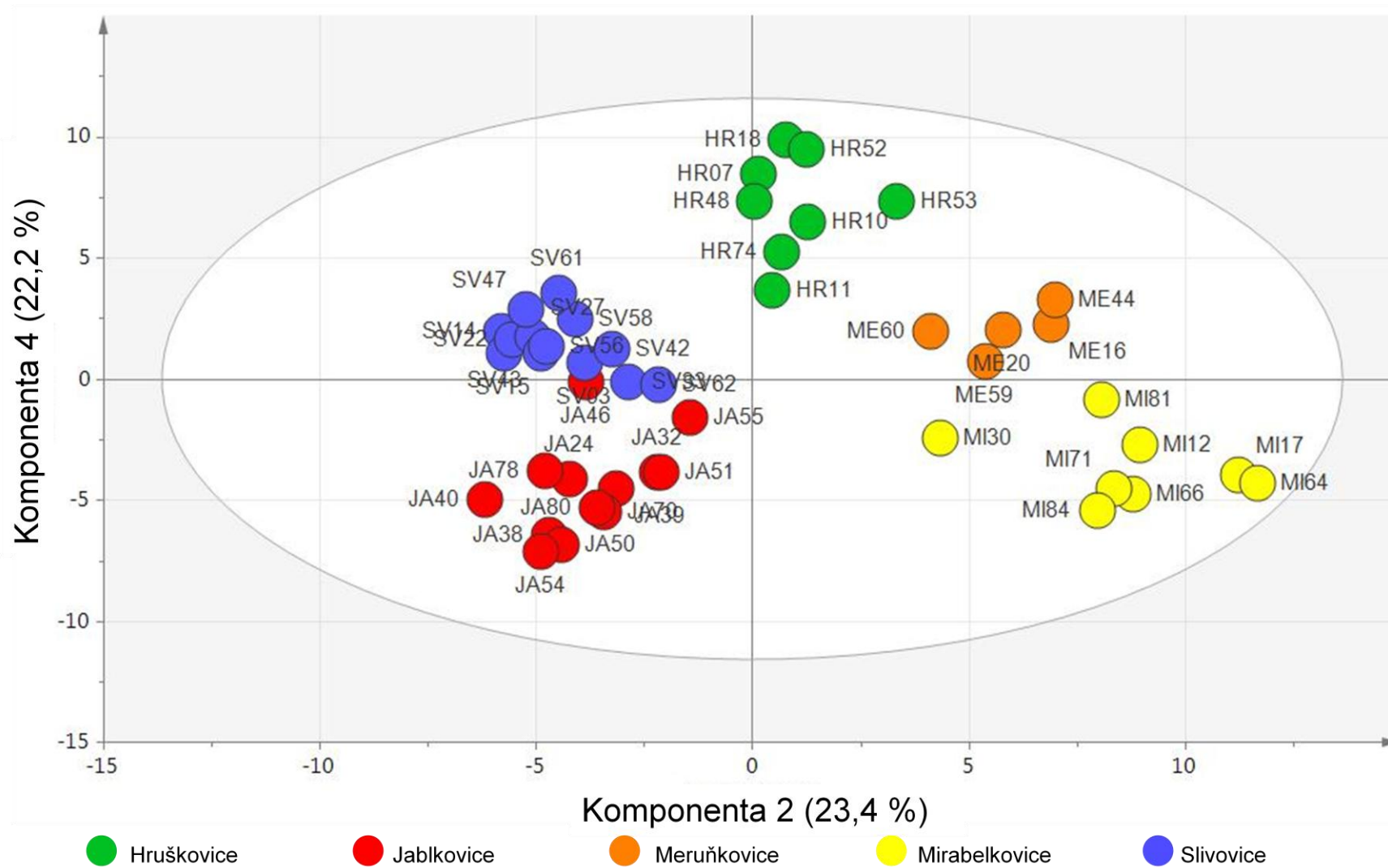
6 PŘÍLOHY



Příloha 1: Graf komponenty 3 v závislosti na komponentě 1, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce.



Příloha 2: Graf komponenty 3 v závislosti na komponentě 2, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce.



Příloha 3: Graf komponenty 4 v závislosti na komponentě 2, k rozlišení destilátů podle druhu ovoce.

Příloha 4: Hodnoty logaritmu pravděpodobnostního poměru pro pozorované a predikované objekty (predikční soubor).

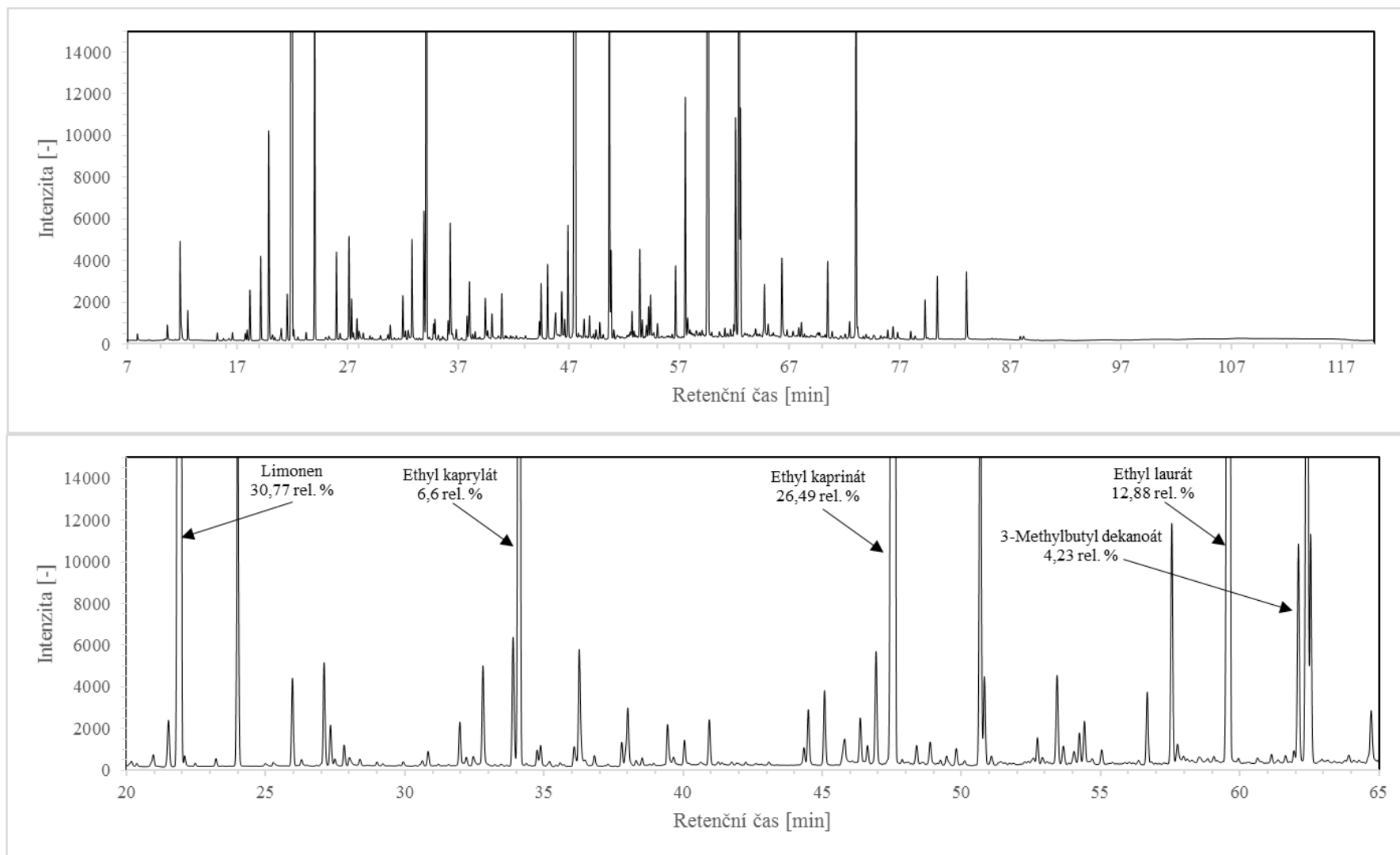
| Model | Označení vzorků | LLR _{pozor.} (hrušky) | LLR _{predik.} (hrušky) | LLR _{pozor.} (jablka) | LLR _{predik.} (jablka) | LLR _{pozor.} (meruňky) | LLR _{predik.} (meruňky) | LLR _{pozor.} (mirabelky) | LLR _{predik.} (mirabelky) | LLR _{pozor.} (švestky) | LLR _{predik.} (švestky) |
|---------------------------------|-----------------|-----------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------------|
| Predikce neznámých vzorků | HR49 | - | 4,836 | - | -5,319 | - | -17,580 | - | -3,925 | - | -19,460 |
| | JA37 | - | -13,292 | - | 16,339 | - | -14,908 | - | -14,258 | - | -15,327 |
| | JA65 | - | -12,250 | - | 11,570 | - | -11,899 | - | -13,767 | - | -15,100 |
| | SV34 | - | -16,733 | - | -5,501 | - | -17,897 | - | -12,430 | - | 11,114 |
| | SV57 | - | -12,501 | - | -13,896 | - | -14,632 | - | -13,659 | - | 13,241 |
| | Ořechovice | - | -3,031 | - | -5,742 | - | -12,937 | - | -12,625 | - | -7,112 |
| | Bezinkovice | - | -2,293 | - | -6,338 | - | -12,082 | - | -12,831 | - | -7,903 |
| | Dýňovice | - | -6,458 | - | -1,786 | - | -14,056 | - | -11,138 | - | -8,009 |
| | Malinovice | - | -4,714 | - | -7,050 | - | -11,162 | - | -13,915 | - | -4,605 |
| | Pampeliškovice | - | -5,066 | - | -8,293 | - | -10,374 | - | -11,957 | - | -5,757 |
| | Žitná | - | -5,884 | - | -3,831 | - | -12,775 | - | -11,120 | - | -7,837 |
| | Bezovice | - | -12,218 | - | -7,774 | - | -11,094 | - | -7,798 | - | -2,564 |
| | Višňovice 1 | - | -5,727 | - | -3,323 | - | -13,577 | - | -13,371 | - | -5,449 |
| | Višňovice 2 | - | -3,979 | - | -2,159 | - | -11,934 | - | -15,224 | - | -8,151 |
| Vínovice | - | -6,543 | - | -3,874 | - | -13,150 | - | -16,312 | - | -1,566 | |
| Mandlovice | - | -5,031 | - | -4,786 | - | -14,541 | - | -10,439 | - | -6,650 | |
| Pracovní model OPLS | HR07 | 13,816 | 14,561 | -13,816 | -12,125 | -13,816 | -13,609 | -13,816 | -16,073 | -13,816 | -14,201 |
| | HR10 | 13,816 | 9,430 | -13,816 | -11,975 | -13,816 | -12,439 | -13,816 | -12,650 | -13,816 | -13,813 |
| | HR11 | 13,816 | 4,830 | -13,816 | -6,010 | -13,816 | -14,119 | -13,816 | -11,373 | -13,816 | -14,774 |
| | HR18 | 13,816 | 18,133 | -13,816 | -15,101 | -13,816 | -14,618 | -13,816 | -15,418 | -13,816 | -14,442 |
| | HR48 | 13,816 | 12,277 | -13,816 | -11,451 | -13,816 | -15,178 | -13,816 | -14,241 | -13,816 | -12,854 |
| | HR52 | 13,816 | 17,662 | -13,816 | -14,961 | -13,816 | -14,708 | -13,816 | -14,287 | -13,816 | -15,152 |
| | HR53 | 13,816 | 12,754 | -13,816 | -16,438 | -13,816 | -15,134 | -13,816 | -7,850 | -13,816 | -14,778 |
| | HR74 | 13,816 | 5,325 | -13,816 | -10,515 | -13,816 | -11,512 | -13,816 | -12,960 | -13,816 | -11,785 |

Příloha 4 (pokračování): Hodnoty logaritmů pravděpodobnostního poměru pro pozorované a predikované objekty.

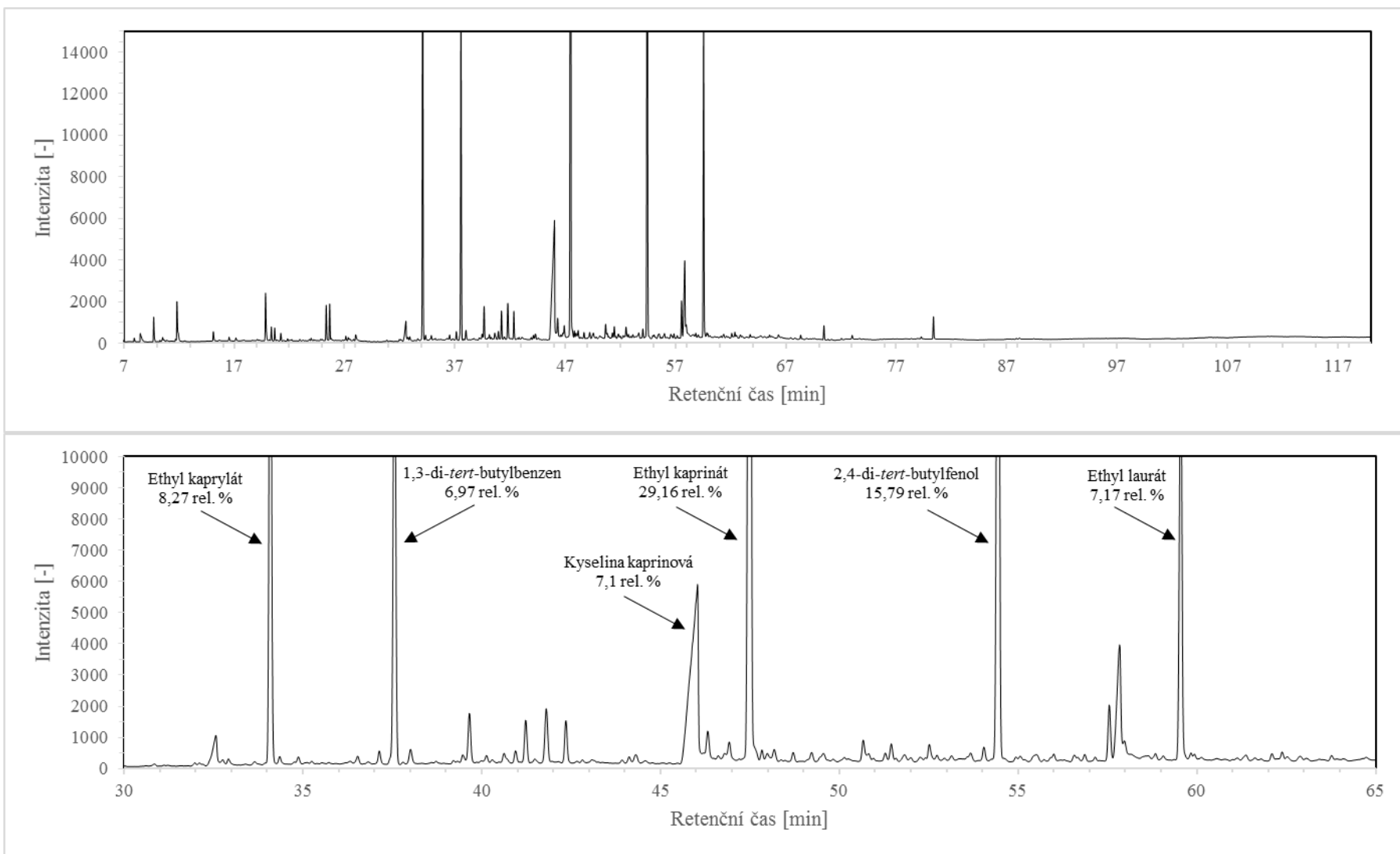
| | | | | | | | | | | | |
|----------------------------|-------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| Pracovní model OPLS | JA24 | -13,816 | -12,727 | 13,816 | 11,571 | -13,816 | -13,686 | -13,816 | -14,286 | -13,816 | -12,318 |
| | JA32 | -13,816 | -11,529 | 13,816 | 8,250 | -13,816 | -13,824 | -13,816 | -10,645 | -13,816 | -13,699 |
| | JA38 | -13,816 | -16,417 | 13,816 | 16,744 | -13,816 | -14,102 | -13,816 | -13,547 | -13,816 | -14,125 |
| | JA39 | -13,816 | -14,107 | 13,816 | 10,215 | -13,816 | -12,635 | -13,816 | -12,358 | -13,816 | -12,562 |
| | JA40 | -13,816 | -13,730 | 13,816 | 16,543 | -13,816 | -14,381 | -13,816 | -17,363 | -13,816 | -12,517 |
| | JA46 | -13,816 | -5,769 | 13,816 | 4,105 | -13,816 | -12,636 | -13,816 | -16,915 | -13,816 | -10,231 |
| | JA50 | -13,816 | -16,251 | 13,816 | 16,650 | -13,816 | -16,316 | -13,816 | -11,464 | -13,816 | -14,065 |
| | JA51 | -13,816 | -11,722 | 13,816 | 6,246 | -13,816 | -16,120 | -13,816 | -8,616 | -13,816 | -11,235 |
| | JA54 | -13,816 | -17,369 | 13,816 | 18,705 | -13,816 | -13,976 | -13,816 | -13,708 | -13,816 | -15,099 |
| | JA55 | -13,816 | -8,463 | 13,816 | 3,290 | -13,816 | -11,627 | -13,816 | -11,852 | -13,816 | -12,795 |
| | JA70 | -13,816 | -13,372 | 13,816 | 15,249 | -13,816 | -13,225 | -13,816 | -12,917 | -13,816 | -17,182 |
| | JA78 | -13,816 | -12,449 | 13,816 | 12,205 | -13,816 | -12,471 | -13,816 | -16,413 | -13,816 | -12,319 |
| | JA80 | -13,816 | -13,751 | 13,816 | 13,706 | -13,816 | -14,017 | -13,816 | -12,481 | -13,816 | -14,905 |
| | ME16 | -13,816 | -14,071 | -13,816 | -15,409 | 13,816 | 14,182 | -13,816 | -11,718 | -13,816 | -14,431 |
| | ME20 | -13,816 | -13,872 | -13,816 | -12,693 | 13,816 | 13,675 | -13,816 | -13,666 | -13,816 | -14,892 |
| | ME44 | -13,816 | -12,938 | -13,816 | -18,794 | 13,816 | 13,799 | -13,816 | -11,639 | -13,816 | -11,874 |
| | ME59 | -13,816 | -14,225 | -13,816 | -10,802 | 13,816 | 8,606 | -13,816 | -10,678 | -13,816 | -14,348 |
| | ME60 | -13,816 | -14,765 | -13,816 | -10,794 | 13,816 | 13,656 | -13,816 | -16,657 | -13,816 | -12,887 |
| | MI12 | -13,816 | -13,135 | -13,816 | -16,517 | -13,816 | -12,171 | 13,816 | 11,244 | -13,816 | -10,867 |
| | MI17 | -13,816 | -12,974 | -13,816 | -16,372 | -13,816 | -14,084 | 13,816 | 17,062 | -13,816 | -15,078 |
| | MI30 | -13,816 | -10,041 | -13,816 | -6,513 | -13,816 | -13,518 | 13,816 | 1,741 | -13,816 | -13,116 |
| | MI64 | -13,816 | -14,167 | -13,816 | -17,635 | -13,816 | -14,630 | 13,816 | 18,848 | -13,816 | -13,862 |
| | MI66 | -13,816 | -14,059 | -13,816 | -10,902 | -13,816 | -14,687 | 13,816 | 13,037 | -13,816 | -14,835 |
| | MI71 | -13,816 | -15,912 | -13,816 | -10,731 | -13,816 | -11,157 | 13,816 | 10,306 | -13,816 | -13,952 |
| SP81 | -13,816 | -9,132 | -13,816 | -16,282 | -13,816 | -10,701 | 13,816 | 6,867 | -13,816 | -12,199 | |
| SP84 | -13,816 | -15,433 | -13,816 | -8,535 | -13,816 | -14,855 | 13,816 | 12,048 | -13,816 | -14,672 | |
| SV03 | -13,816 | -16,731 | -13,816 | -16,099 | -13,816 | -15,704 | -13,816 | -9,944 | 13,816 | 17,031 | |

Příloha 4 (pokračování): Hodnoty logaritmů pravděpodobnostního poměru pro pozorované a predikované objekty.

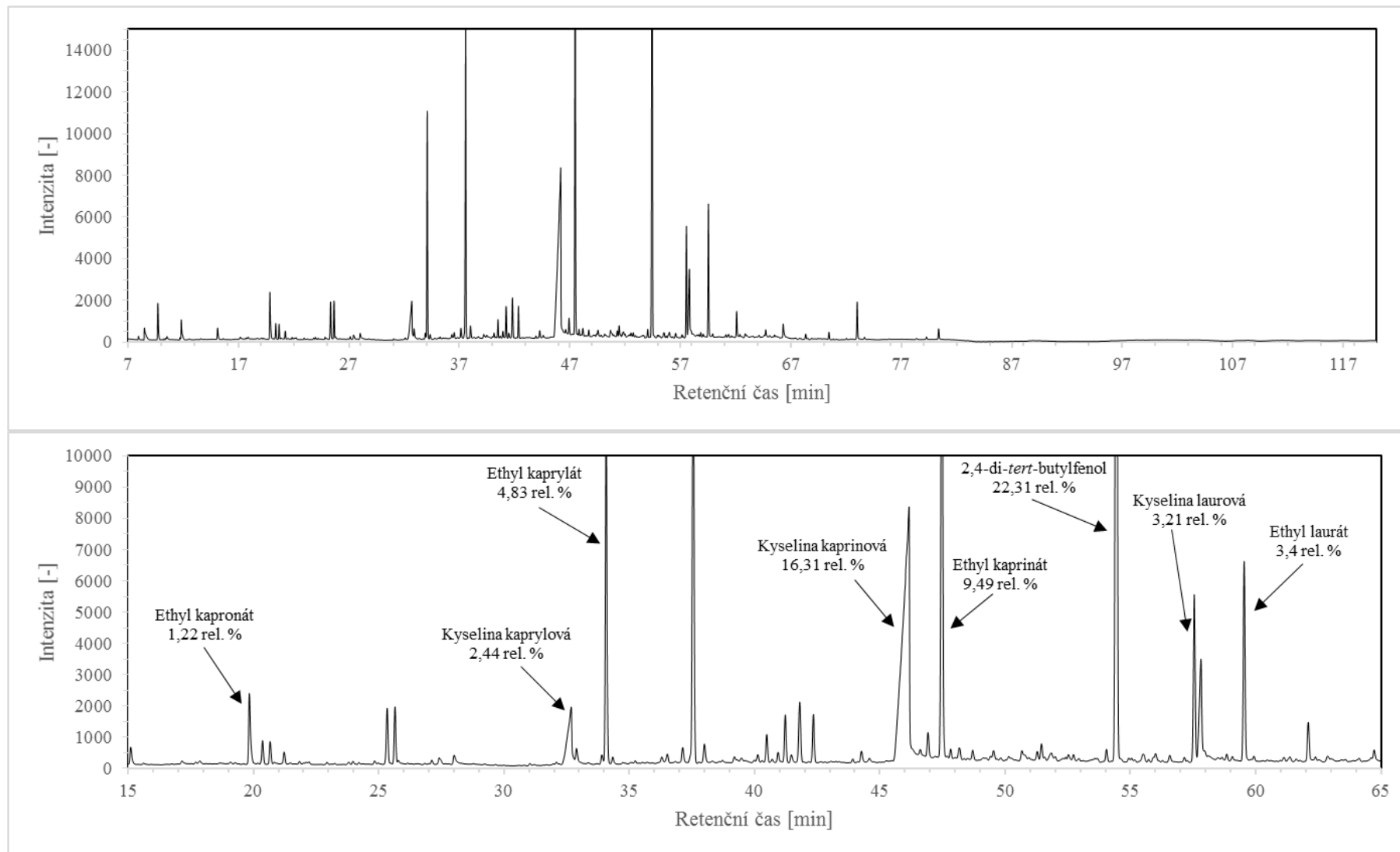
| | | | | | | | | | | | |
|----------------------------|-------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|--------|--------|
| Pracovní model OPLS | SV14 | -13,816 | -14,724 | -13,816 | -12,171 | -13,816 | -11,059 | -13,816 | -18,020 | 13,816 | 14,527 |
| | SV15 | -13,816 | -14,663 | -13,816 | -13,145 | -13,816 | -17,478 | -13,816 | -13,173 | 13,816 | 17,012 |
| | SV22 | -13,816 | -15,134 | -13,816 | -12,803 | -13,816 | -12,758 | -13,816 | -16,107 | 13,816 | 15,356 |
| | SV27 | -13,816 | -13,189 | -13,816 | -11,699 | -13,816 | -13,030 | -13,816 | -15,771 | 13,816 | 12,241 |
| | SV33 | -13,816 | -14,158 | -13,816 | -8,918 | -13,816 | -12,693 | -13,816 | -11,335 | 13,816 | 5,658 |
| | SV42 | -13,816 | -12,741 | -13,816 | -13,806 | -13,816 | -15,337 | -13,816 | -10,641 | 13,816 | 11,078 |
| | SV43 | -13,816 | -14,750 | -13,816 | -13,389 | -13,816 | -15,622 | -13,816 | -12,864 | 13,816 | 15,179 |
| | SV47 | -13,816 | -12,467 | -13,816 | -13,104 | -13,816 | -10,013 | -13,816 | -18,514 | 13,816 | 12,651 |
| | SV56 | -13,816 | -12,299 | -13,816 | -9,869 | -13,816 | -13,567 | -13,816 | -15,151 | 13,816 | 9,438 |
| | SV58 | -13,816 | -12,368 | -13,816 | -14,273 | -13,816 | -11,440 | -13,816 | -15,291 | 13,816 | 11,924 |
| | SV61 | -13,816 | -10,549 | -13,816 | -19,188 | -13,816 | -16,171 | -13,816 | -13,175 | 13,816 | 17,637 |
| | SV62 | -13,816 | -17,105 | -13,816 | -14,588 | -13,816 | -14,086 | -13,816 | -7,675 | 13,816 | 12,007 |



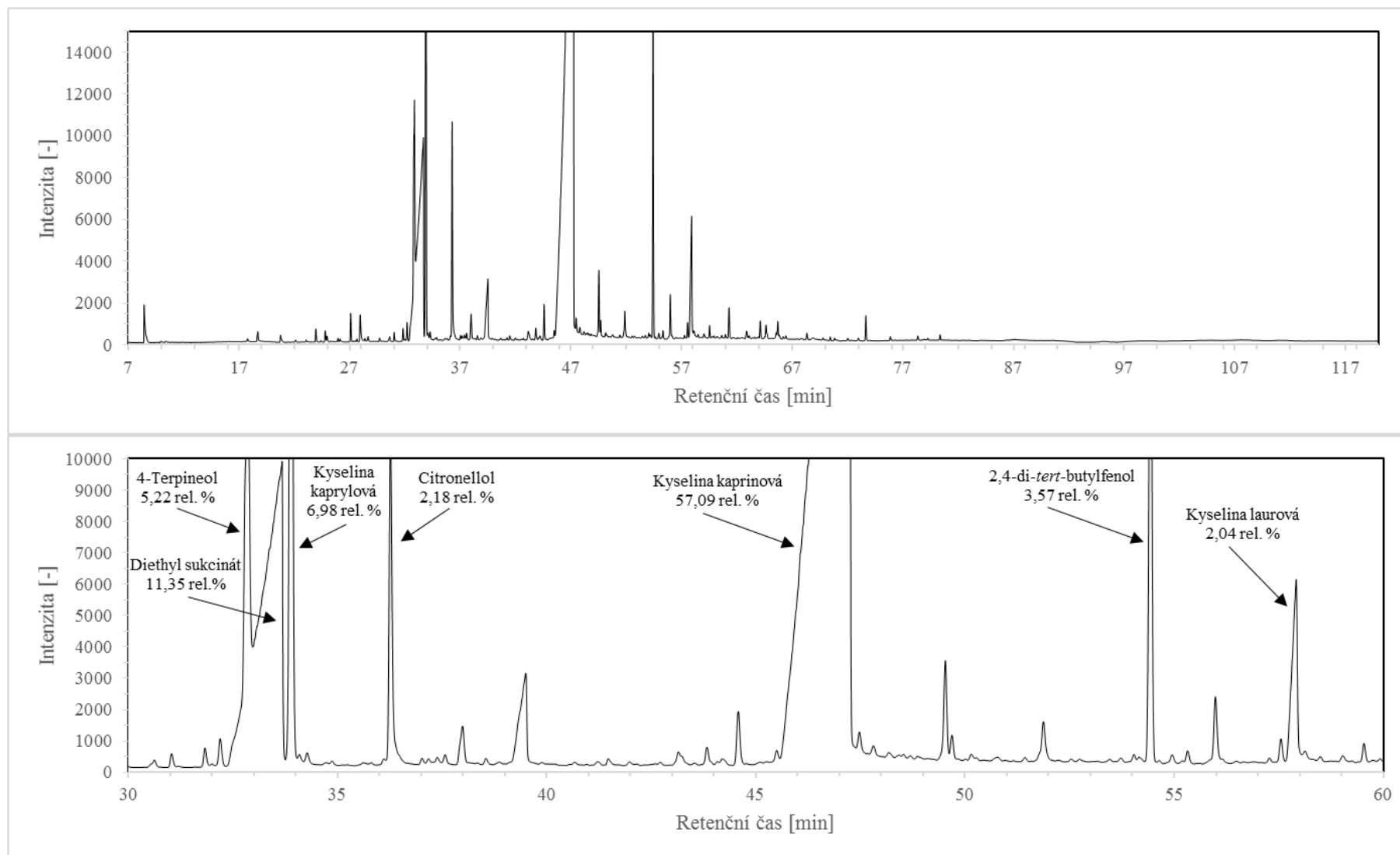
Příloha 5: Chromatogram z GC-FID analýzy destilátu z květu černého bezu.



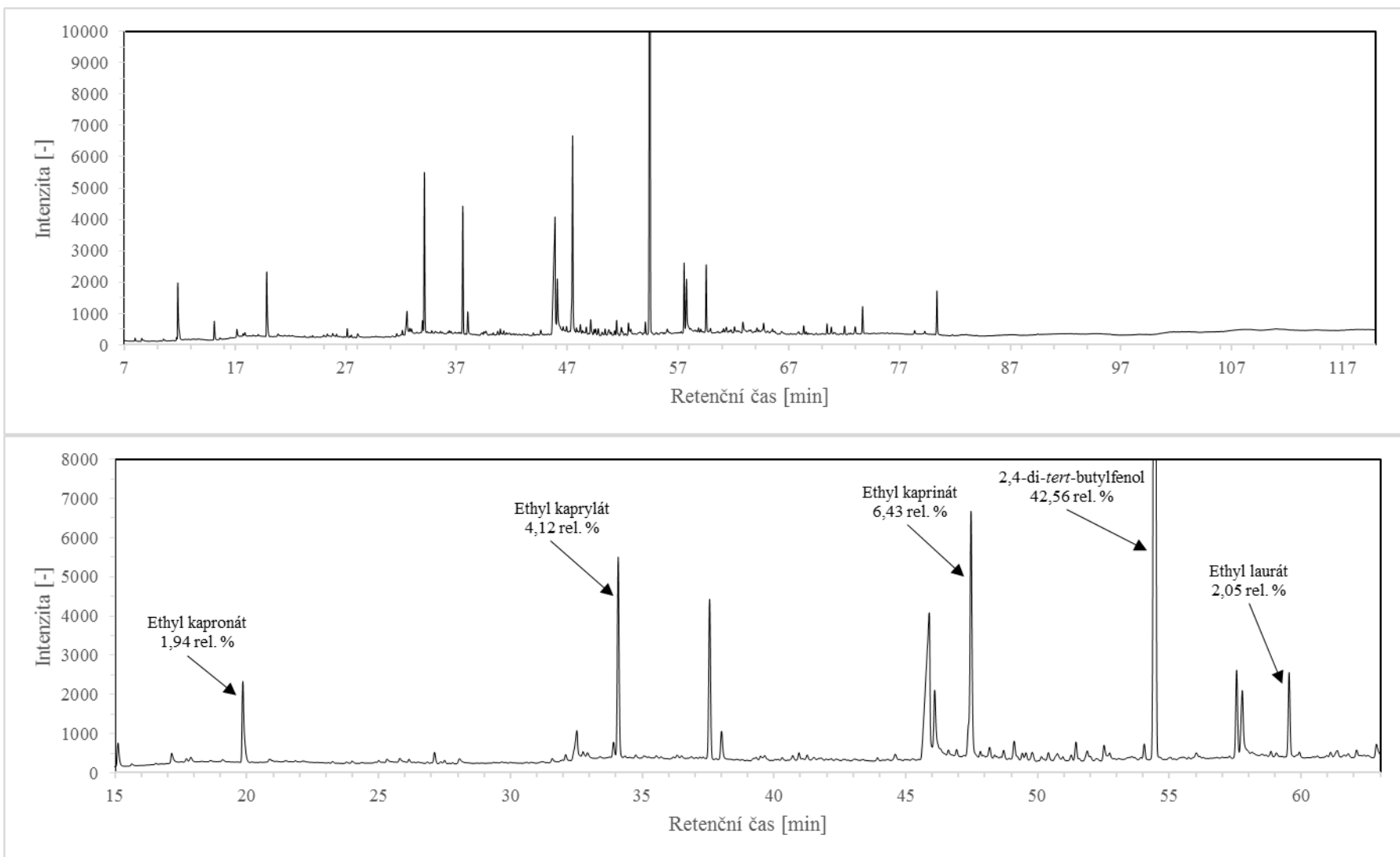
Příloha 6: Chromatogram z GC-FID analýzy bezinkového destilátu.



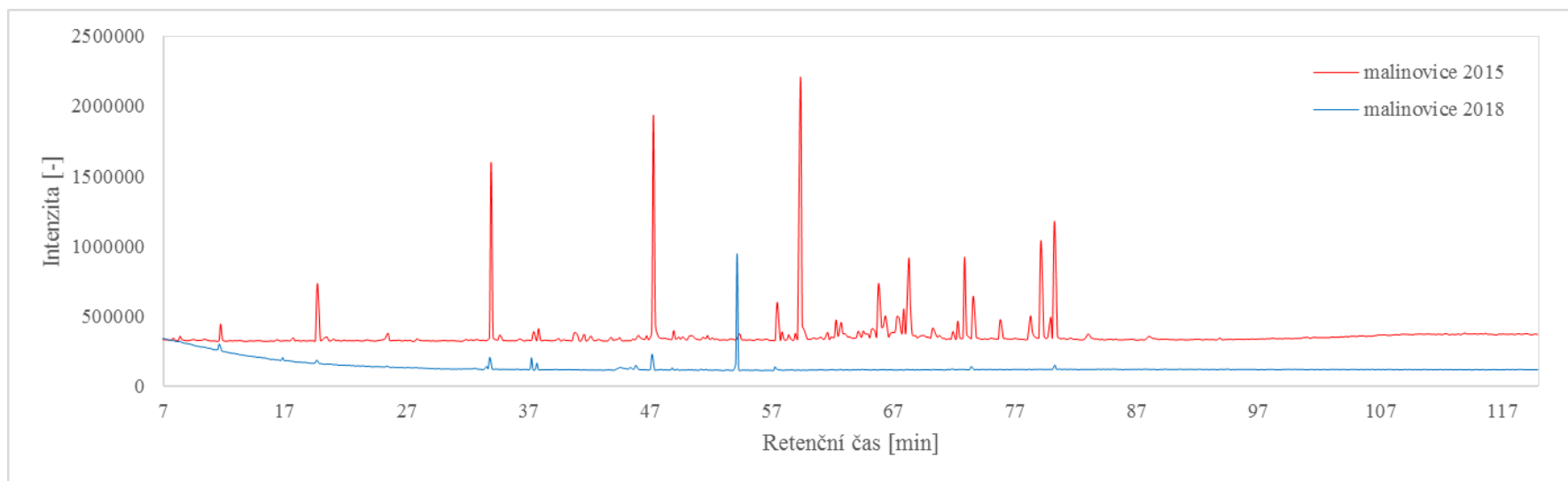
Příloha 7: Chromatogram z GC-FID analýzy žitného destilátu.



Příloha 8: Chromatogram z GC-FID analýzy pampeliškového destilátu.



Příloha 9: Chromatogram z GC-FID analýzy malinového destilátu.



Příloha 10: Chromatogramy z GC-MS analýzy malinového destilátu před a po uskladnění.