

Verifikace a 3D vizualizace mononenasycených kyselin PUFA omega-3

Verification and 3D visualization monounsaturated acids omega-3
PUFA

Miroslava Rehwaldová

Bakalářská práce
2013

 Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně

Fakulta aplikované informatiky

akademický rok: 2012/2013

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Miroslava REHWALDOVÁ**
Osobní číslo: **A10652**
Studijní program: **B3902 Inženýrská informatika**
Studijní obor: **Bezpečnostní technologie, systémy a management**
Forma studia: **kombinovaná**

Téma práce: **Verifikace a 3D vizualizace mononenasycených kyselin PUFA omega-3**

Zásady pro vypracování:

1. Seznamte se s problematikou využití plynové chromatografie, se zaměřením na oblast kapalně stacionárních fází.
2. Přehlednou formou uveďte chromatografické metody.
3. Uveďte technické a biologické metody lokalizace biologického materiálu.
4. Proveďte chemickou analýzu plynovou chromatografií mononenasycených kyselin PUFA omega-3.
5. Verifikujte naměřená data a graficky vyjádřete v 3D prostředí.
6. Analyzujte uvedené využití zvolené metody v praxi.

Rozsah bakalářské práce:

Rozsah příloh:

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

Seznam odborné literatury:

1. **BALÍKOVÁ, Marie: Forezní a klinická toxikologie (Dotisk 1. Vydání), Praha 2004, 2007, ISBN: 978-80-7262-284-9**
2. **OPEKAR, F., JELÍNEK, I., RYCHLOVSKÝ, P., PLZÁK, Z.: Základní analytická chemie, Praha 2002**
3. **PURNELL, Howard: Plynová Chromatografie, SNTL, Praha 1966**
4. **SMOLKOVÁ, Eva: Plynová chromatografie I. Teoretické základy, SPN, Praha 1975**
5. **SMOLKOVÁ, Eva: Plynová chromatografie II. Instrumentální část, SPN, Praha 1975**
6. **ŠTĀSTNÁ, Sylvie a kolektiv: Přehled vyšetření metabolitů pro diagnostiku dědičných metabolických poruch (1. vydání), Praha 2008., ISBN: 978-80-904219-0-5**

Vedoucí bakalářské práce:

Ing. Ján Ivanka

Ústav bezpečnostního inženýrství

Datum zadání bakalářské práce:

25. února 2013

Termín odevzdání bakalářské práce:

30. května 2013

Ve Zlíně dne 25. února 2013

prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.
děkan



doc. Mgr. Milan Adámek, Ph.D.
ředitel ústavu

ABSTRAKT

Bakalářská práce bude prezentovat verifikaci, 3D vizualizaci mononenasyčených mastných kyselin a využití metod pro identifikaci biologického materiálu. V úvodní části je popsána metoda a historie plynové chromatografie.

Praktickou část tvoří zadání a vypracování chemické analýzy metodou verifikace plynové chromatografie mononenasyčených kyselin PUFA Omega – 3 a verifikaci naměřených dat a zobrazení v 3D prostředí.

Klíčová slova: PUFA Omega – 3 mononenasyčené mastné kyseliny, plynová chromatografie, analýza, chemické látky, forenzní toxikologie.

ABSTRACT

Bachelor thesis will present here verification, 3D visualization of monounsaturated fatty acids, and the use of methods for the identification of biological material. The introductory section describes the method of gas chromatography and its history. The practical part consists of assigning and developing chemical analysis through the use of the method of gas chromatography verification of monounsaturated acids PUFA Omega - 3 and verification of the measured data and visual representation in a 3D environment.

Keywords: PUFA Omega - 3 monounsaturated fatty acids, gas chromatography, analysis, chemical substances, forensic toxicology.

Na tomto místě bych ráda poděkovala vedoucímu bakalářské práce Ing. Jánů Ivankovi za profesionální vedení a pomoc při tvorbě bakalářské práce, odborné návrhy, připomínky a cenné rady.

Prohlašuji, že

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

Prohlašuji,

- že jsem na bakalářské práci pracoval samostatně a použitou literaturu jsem citoval. V případě publikace výsledků budu uveden jako spoluautor.
- že odevzdaná verze bakalářské práce a verze elektronická nahraná do IS/STAG jsou totožné.

Ve Zlíně

.....
podpis diplomanta

OBSAH

ÚVOD	9
I TEORETICKÁ ČÁST	10
1 METODA PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE	11
1.1 HISTORIE CHROMATOGRAFIE.....	11
1.2 CHROMATOGRAFIE.....	13
1.2.1 Definice chromatografie.....	13
1.2.2 Mobilní fáze.....	14
1.2.3 Stacionární fáze (GC).....	14
1.2.4 Kapalně stacionární fáze v (GC).....	14
1.3 DĚLENÍ CHROMATOGRAFICKÝCH METOD.....	14
1.3.1 Plynová chromatografie (GC).....	15
1.3.2 Adsorpce.....	15
1.3.3 Měřicí přístroj - plynový chromatograf.....	15
1.3.4 Nosný plyn a regulátor průtoku.....	16
1.3.5 Nástříkový port.....	17
1.3.6 Splitování.....	17
1.3.7 Splitovací poměr.....	17
1.3.8 Nástřík bez splitu.....	17
1.3.9 Chromatografické kolony.....	18
1.3.10 Termostat.....	19
1.3.11 Detektor.....	19
1.3.12 Druhy detektorů.....	19
1.3.13 Záznam chromatografu.....	20
1.3.14 Chromatogram.....	21
1.3.15 Kapalinová chromatografie (LC).....	21
2 VYUŽITÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE (GC)	23
2.1 APLIKACE PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE (GC).....	23
3 OMEGA 3 - PUFA NENASYCENÉ MASTNÉ KYSELINY	24
3.1 MASTNÉ KYSELINY.....	24
II PRAKTICKÁ ČÁST	25
4 ANALÝZA PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE (GC)	26
4.1 ZADÁNÍ ANALÝZY.....	26
4.2 VYPRACOVÁNÍ ANALÝZY.....	26
4.2.1 Identifikace organických látek přítomných ve vzorku A	26

4.2.2	Identifikace organických látek přítomných ve vzorku B.....	29
4.2.3	Identifikace organických látek přítomných ve vzorku C.....	31
4.2.4	Procentuální zastoupení sloučenin ve vzorku.....	33
4.2.5	Vyhodnocení analýzy.....	33
4.2.6	Naměřené hodnoty v 3D vertexu.....	34
4.2.7	Záznam chromatogramu.....	36
5	BUDOUCNOST PLYNOVÉ CHROMATOGRFIE.....	38
	ZÁVĚR.....	39
	ZÁVĚR V ANGLIČTINĚ.....	40
	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY.....	41
	SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK.....	43
	SEZNAM OBRÁZKŮ.....	44
	SEZNAM TABULEK.....	45
	SEZNAM GRAFŮ.....	46

ÚVOD

Téma bakalářské práce „*Verifikace a 3D vizualizace mononenasycených kyselin PUFA omega-3*“ je důležitá při odhalování určité chemické analýzy dat s využitím metod pro identifikaci biologického materiálu ve forenzní kriminalistice, ale i jako metoda sledování fyzikálně chemických pochodů a vlastností jako je (adsorpce, katalytické difúzní pochody) a jako metoda preparativní (izolace čistých složek vzorku). Adsorpce je separační proces, jehož principem je hromadění plynné látky ze směsi plynů nebo rozpuštěné látky v kapalině (adsorbátu) na povrchu pevné látky (adsorbentu) účinkem mezipovrchových přitažlivých sil. Dále je můžeme využít při zkoumání dalších inkrementů v kapalinách adsorbátů.

Je navržena pro rychlejší separace, zvýšení kvality dat a maximální flexibilitu s vysoce citlivou detekcí. Zvládá i nejnáročnější aplikace a to včetně: posuzování výrobků a bezpečnost potravin, forenzní toxikologickou analýzu, analýzu vzorků životního prostředí, klinické a toxikologické testování, analýzu uhlovodíků, ropy i paliva. Robustní a spolehlivé systémy jsou k dispozici v široké škále standardních a zakázkových konfigurací, které mohou být vybrány a optimalizovány pro všechna laboratorní prostředí, nebo aplikace. Má široké uplatnění zejména ve forenzní kriminalistice při odhalování různých trestných činů.

I. TEORETICKÁ ČÁST

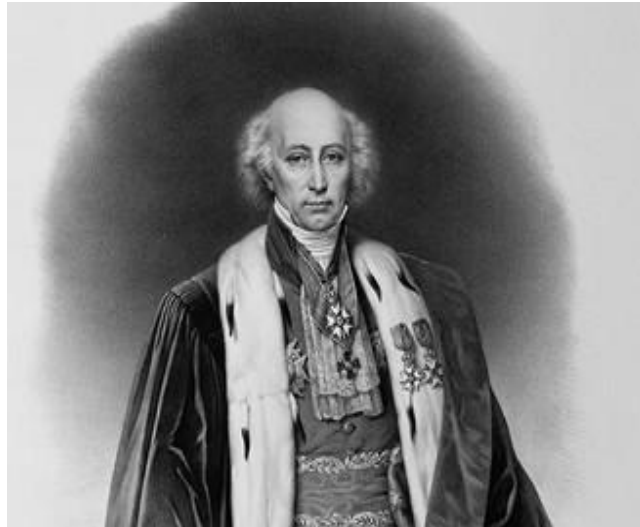
1 METODA PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE

Plynová chromatografie je separační metoda a analytická metoda, při níž je pohyblivou fází plyn. Je založená na rozdílu v distribuci látek mezi dvě faze mobilní a stacionární, která má významné postavení v analýze plynných nebo těkavých látek. Hlavní výhody této techniky patří jednoduché a rychlé provedení analýzy, při které se účinná separace látek a malé množství vzorku potřebuje k analýze. Významné je její využití ve forenzní kriminalistice.

1.1 HISTORIE CHROMATOGRAFIE

Ruský vědec, botanik, fyziolog a biochemik Michail Semjonovič Cvet 1872 – 1919 objevitel sloupcové adsorpční chromatografie. V roce 1906 provedl experiment, u kterého rozdělil chlorofyl na jeho složky. Během níž se využívá dvou fází. Která jsou pohyblivá (mobilní) a nepohyblivá (stacionární) fáze. Při průchodu mobilní fáze dochází ve stacionární fázi k oddělení složek díky různým fyzikálně – chemickým vlastnostem. Cvet tuto metodu pojmenoval „chromatografie“ z řeckého slova chroma – barva.

Hledání jedů v minulosti, kde se první metody zaměřovali zejména na průkaz těžkých kovů, jakým je např. arsenik (otrušík), chemicky oxid arsenitý. To je případ klasických otrav arsenikem, jehož smrtelná dávka byla okolo 150 miligramů. Do historie se zapsal francouzský chemik a toxikolog Mathieu Orfila (1787 – 1853), zakladatel forenzní toxikologie. V 19. Století bylo možné koupit arsenik na předpis, užíval je jako jed na krysy. Zneužívání bylo dost časté, bohužel se nedalo prokázat. Až britský chemik James Marsh přišel v roce 1836 s testem, který ho prokázal.



Obr. 1: Mathieu Orfila[7]

V roce 1980 zakládá průkopník forenzní antropologie William Basse (*1928) Forenzní antropologické centrum, kterému se říká Farma mrtvých: je to místo, kde smrt učí živé. Je součástí Tennesseeeské univerzity v Knoxville. Místo, kde věda zkoumá proces rozkladu lidského těla. To vše vědci pečlivě sledují a zaznamenávají. Zkoumají, jaký vliv mají různé podmínky na tempo rozkladu neživého lidského biologického materiálu.



Obr. 2: Vpravo William Marvin Bass[8]

1.2 CHROMATOGRRAFIE

Chromatografie je jedna z nejvýznamnějších moderních metod, která slouží k separaci a analýze složitých směsí. Umožňuje dělení složek vzorku (analyty), které interagují v různé míře se stacionární a mobilní fází. Taktéž k identifikaci a stanovení velkého počtu organických i anorganických látek. Má uplatnění ve všech vědeckých odvětvích včetně lékařství.



Obr. 3: Chromatografický přístroj[9]

1.2.1 Definice chromatografie

Chromatografie je analytická a zároveň separační fyzikálně chemická metoda pro analýzu a separaci směsí látek, kde základním principem je rozdělení složek směsi stacionární a mobilní fází. Chromatografické analýzy se zpravidla používají pro složité směsi látek, které mají dosti podobné fyzikální a chemické vlastnosti a které by se jinými metodami kvalitativně a kvantitativně analyzovali dosti obtížně, pokud by to bylo vůbec možné.

1.2.2 Mobilní fáze

Mobilní fáze se v chromatografickém systému pohybuje. Nosnou fází může být kapalina, nebo plyn, například helium, dusík, argon a vodík. Pokud je mobilní fází kapalina, nazýváme tuto chromatografii „kapalinová chromatografie“, a je-li mobilní fází plyn, nazýváme tuto chromatografii „plynová chromatografie“. Využití ve forenzní kriminalistice.

1.2.3 Stacionární fáze v (GC)

Stacionární fáze je v chromatografickém systému fáze, která je nepohyblivá. Stacionární fází může být pevná látka, nebo film kapaliny zakotvený na pevné. Rozhodně to ovšem neznamená, že mobilní fáze je vždy kapalina a stacionární fází je vždy pevná látka.

1.2.4 Kapalně stacionární fáze v (GC)

V praxi mají větší uplatnění než adsorbenty. U zakotvené kapalně stacionární fáze je požadována tenze par, malá viskozita, chemická stabilita při pracovní teplotě, dobrá rozpouštěcí schopnost a selektivita. A mohou být použity polyethylen glykoly, polypropylen glykoly, polyestery a polyxiloxany. Pro účinnou separaci je důležitá i vhodná volba nosičů zakotvených fází. Materiál nosiče musí být chemicky inertní a jeho sorpční aktivita musí být minimální. Sorpční aktivita nosiče se omezuje praním v minerálních kyselinách, nebo alkalických hydroxidech a úpravou pomocí chlorsilanů. Používají se různé druhy křemelin, vypalované nosiče, teflon, silikagel a skleněné kuličky.

1.3 DĚLENÍ CHROMATOGRAFICKÝCH METOD

Podle fyzikálně chemického dělení:

- adsorpční chromatografie (kapalinová LSC), (plynová GSC)
- rozdělovací chromatografie (kapalinová LLC), (plyn. GLC)
- iontově výměnná chromatografie (IEC)
- gelová chromatografie (GPC)
- afinitní chromatografie (AC)

Podle skupenství mobilní fáze:

- kapalinová chromatografie (LCC)
- plynová chromatografie (GC)

Podle uspořádání stacionární fáze:

- kolonová (sloupcová) chromatografie
- kapilární chromatografie
- chromatografie na tenké vrstvě (TLC)
- chromatografie na papíře (PC)

Podle účelu použití:

- analytická chromatografie
- preparativní chromatografie

1.3.1 Plynová chromatografie (GC)

Plynová chromatografie (GC) má významné postavení v analýze těkavých látek, je to separační a analytická metoda. K výhodám této techniky patří jednoduché a rychlé provedení analýz, účinná separace látek a malé množství potřebné k analýze. Například zkoumání alkoholu v krvi se provádí pomocí plynové chromatografie. Princip separace látek pomocí (GC) je takový, že kolonou stacionární fáze prochází nosný plyn, pohybující se skrz nebo podél stacionární fáze, která je umístěna v koloně. Plynová chromatografie je založena na mechanismu adsorpce, vylučování nebo rozdělování.

1.3.2 Adsorpce

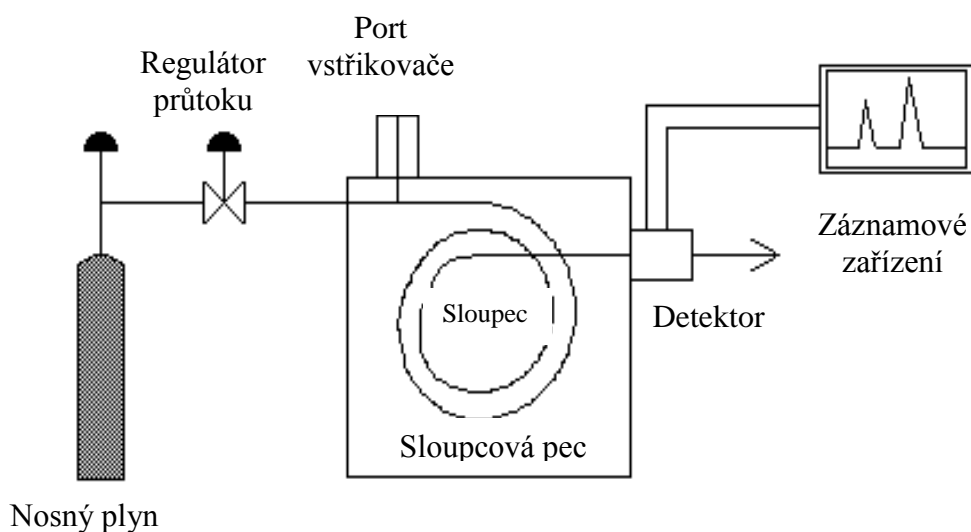
Při zvýšení v oblasti, kde dochází ke vzájemnému styku fází, proti koncentraci uvnitř dané fáze, se nazývá adsorpce. Fází, na jejímž povrchu dochází k hromadění látky z druhé fáze, označujeme jako adsorbent, látku v adsorbovaném stavu nazýváme adsorbát.[4]

1.3.3 Měřicí přístroj – plynový chromatograf

Plynový chromatograf se skládá z částí:

- nádoba s nosným plynem – zdroj a regulace nosného plynu
- vstřikovač vzorku – dávkovací zařízení, kde se pomocí injekční stříkačky vpraví vzorek do proudu nosného plynu.
- vzorky bývají nejen plynné, proto vstřikovač musí být předehřátý na dostatečnou teplotu.
- chromatografická kolona

- detektor
- termostat pro injektor, kolonu a detektor
- výstup dat – systém na zpracování dat, které obstarává počítač přes A/D převodník. Vytisknutý záznam se nazývá chromatogram.



Obr. 4: Schéma plynového chromatografu[10]

- průtok mobilní fáze kolonou musí být optimalizován (van Deemterův vztah)
- průtok injektorem a detektorem je vyšší než průtok kolonou
- mezi injektor a kolonu je zařazen dělič toku (splitter)
- mezi kolonou a detektorem se nachází zařízení na úpravu toku.

1.3.4 Nosný plyn a regulátor průtoku

Nosný plyn musí zajistit transport pro průchod vzorku skrz kolonu. Měl by se blížit svým chováním ideálnímu plynu. Volba ideálního plynu může záležet i na používaném detektoru. K běžně používaným plynům patří dusík, argon, vodík, oxid uhličitý a helium, to je však velmi drahé. Vhání se pod přesně daným tlakem, který zajišťuje konstantnost

měření. Nosný plyn musí obsahovat také molekulární síto pro odstraňování vody a jiných nečistot. A nesmí s ohledem na stacionární fázi a chromatografované látky obsahovat kyslík a vodu. Nosný plyn se téměř vždy odebírá z tlakové láhve a zavádí do kolony pomocí jednoduchého ventilu.[3]

1.3.5 Nástřikový port

Nástřikový port slouží pro vpravení vzorku do plynového chromatografu a do separační kolony. Nástřik se provádí automaticky speciální injekční stříkačkou nebo ručně. Vzorek může být plynný nebo kapalný. Teplota u kapalných vzorků portu je obvykle asi 50° C a vyšší než bod varu, aby došlo k okamžitému převedení vzorku do plynného stavu. Plynný vzorek je zaveden do proudu nosného plynu, který ho transportuje přes kolonu, kde dochází k separaci složek analyzované směsi. Pokud by byl původní vzorek málo těkavý a byl by problém s jeho odpařením, potom se provede jeho derivatizace. Příkladem je málo těkavých mastných kyselin chemickou reakcí na methylestery mastných kyselin, které jsou dobře analyzovatelné plynovým chromatografem.

1.3.6 Splitování

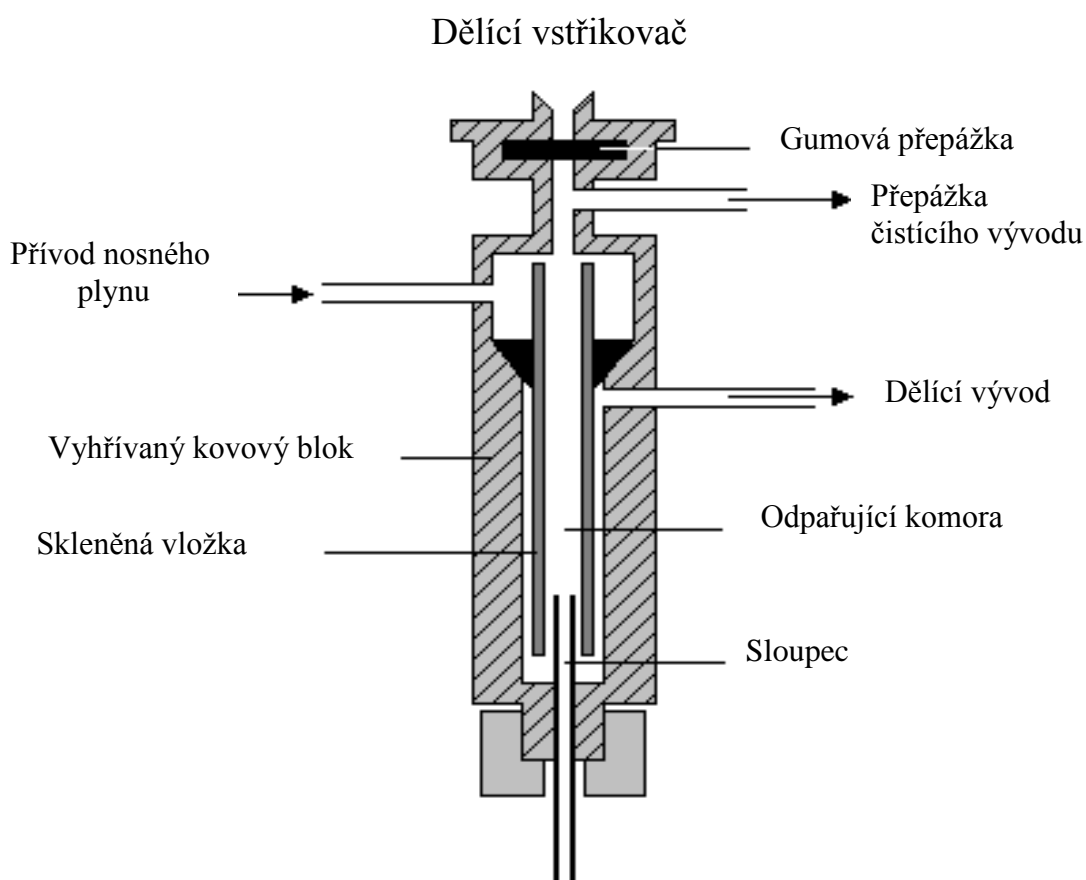
Splitování je technika nástřiku, při které je směs nosného plynu a vzorku v injektoru rozdělena na dvě nestejně části, kdy menší část vstupuje na kolonu a větší část odchází do odpadu.[6]

1.3.7 Splitovací poměr

Splitovací poměr je závislý na relativní velikosti průtoku splitovacím ventilem a kolonou.

1.3.8 Nástřik bez splitu

Nástřik bez splitu se používá při stopové analýze nebo pro analýzu směsí látek, které se výrazně liší v bodu varu.[6]



Obr. 5: Schéma nástřikového portu[11]

1.3.9 Chromatografické kolony

Chromatografické kolony jsou nejdůležitější součástí plynového chromatografu. Je umístěna v peci, která je regulována na určitou teplotu. Separační kolona je nejdůležitější součástí plynového chromatografu. Dneska se současně v GLC používá zpravidla kapilární kolony. Je tvořena kapilárou z taveného křemene, která je z venku potažena filmem z polymeru, který ji chrání před zlomením, nebo jiným poškozením. Vnitřek trubice slouží jako nepohyblivá fáze. Může to být kapalina, nebo adsorbent nanesený na jejích stěnách. Interakcí vzorku ve stacionární fázi dochází k oddělení jednotlivých složek, každá z nich potřebuje na průchod kolonou jiný čas (retenční doba). V plynové chromatografii se kolony dělí do dvou skupin, náplňové kolony a kapilární kolony.

Náplňové kolony:

- náplňové kolony obsahují adsorbent nebo nosič se zakotvenou kapalnou fází,
- mají trubice o průměru 2 až 5 mm, naplněné jemným materiálem,
- který je pokrytý aktivní zakotvenou fází,
- kolony se zhotovují z nerezové oceli nebo skla,
- délka kolon může být od desítek cm do několika m.

Kapilární kolony:

- kapilární kolony jsou tvořeny tenkou (desetiny mm) a dlouhou trubicí,
- vyrábějí se z oceli, nebo taveného křemene,
- nepohyblivá fáze je nanesena na jejích stěnách,
- stacionární fáze je na vnitřních stěnách kapiláry,
- průměr kapiláry je menší než 0,5 mm.

1.3.10 Termostat

Termostat udržuje konstantní teplotu separační kolony během analýzy, nebo teplotu podle nastaveného programu a tlaku.

1.3.11 Detektor

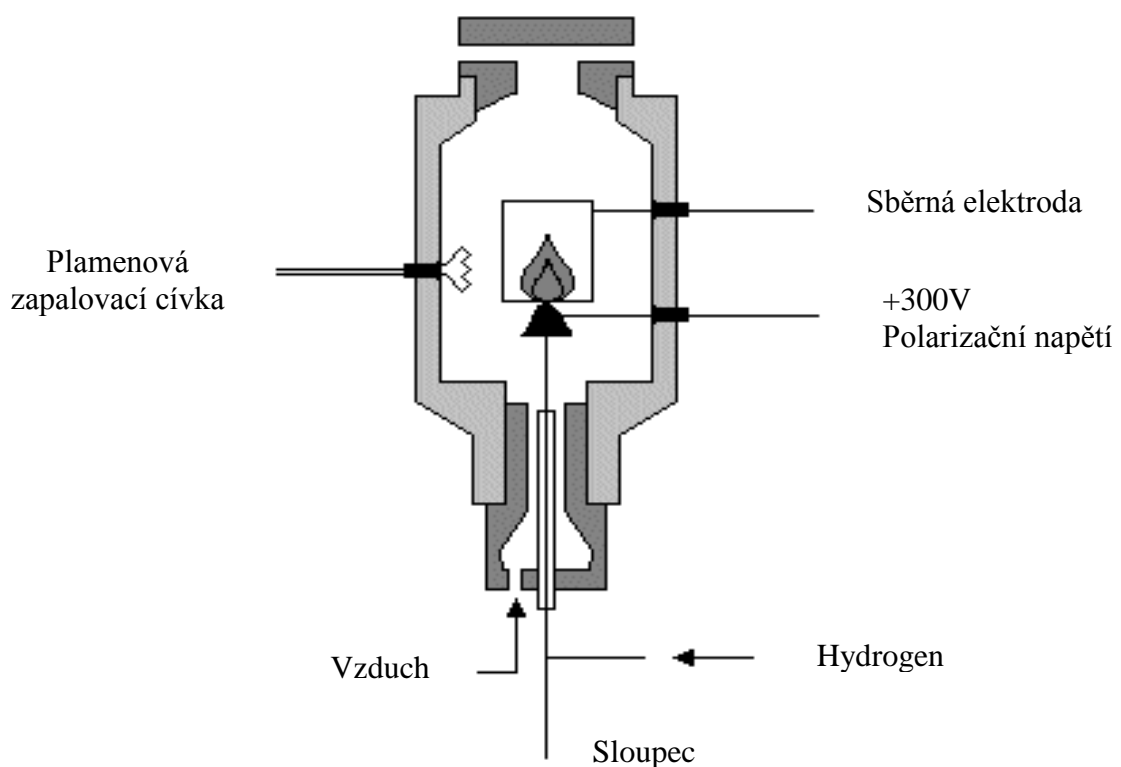
V plynové chromatografii existuje více různých typů detektorů, které mohou být použity. Jednotlivé typy detektorů se liší, jak principem funkce a konstrukcí tak i selektivitou, mezní detekcí, citlivostí a lineárním dynamickým rozsahem. Záleží na aplikaci a na cíli analýzy. Teplotu detektoru volíme slabě vyšší než teplotu kolony, aby nedocházelo ke kondenzaci analytů. Selektivitou detektoru se rozumí jeho schopnost reagovat na řadu sloučenin, které mají společnou fyzikální nebo chemickou vlastnost a konkrétní detektor reaguje na jednu sloučeninu látky určitého typu. Objem v detektoru bývá velmi malý, může být i menší než μl . Nejpoužívanějším detektorem je plamenový ionizační detektor (FID).

1.3.12 Druhy detektorů

- tepelně vodivostní detektor (TCD) – často používaný, zejména pro svou univerzálnost
- plamenový ionizační detektor (FID) – měříme ionizační účinnost hoření
- plamenový ionizační detektor s alkalickým kovem (AFID) – je vhodný zejména ke stanovení dusíku, fosforu a síry v organických sloučeninách

- detektor elektronového záchyty (ECD) – detektor vhodný pro stopovou analýzu pesticidů v životním prostředí
- heliový ionizační detektor (HeD) – univerzální detektor, je citlivý na organické i anorganické sloučeniny, včetně permanentních plynů
- hmotnostně spektrometrický detektor (MS) – univerzální detektor vhodný k identifikaci analyzovaných složek směsi

Ionizační plamenový detektor



Obr. 6: Schéma plamenového ionizačního detektoru[12]

1.3.13 Záznam chromatografu

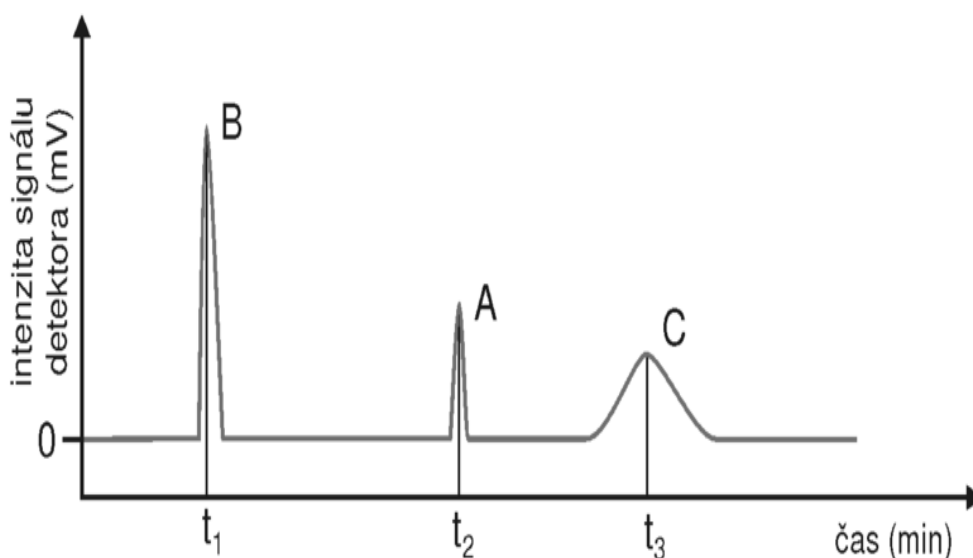
Záznam proudového signálu se převádí na napěťovou odezvu. Získáme grafický záznam v závislosti napěťové odezvy na čase ze vzorků. Ze získaných záznamů chromatografu lze vyhodnotit retenční parametry signálů, plochy a výšky píků.

1.3.14 Chromatogram

Chromatograf je grafický výstup z detektoru, který vzniká během chromatografického procesu a vyjadřuje závislost signálu (osa y) na elučním čase, nebo objemu (osa x). V GC chromatografii je chromatograf tvořen

soustavou píků, které mají různou výšku a plochu, od sebe mají různou vzdálenost a v ideálním případě jsou symetrické a mají tvar Gaussovy křivky.

každý pík na chromatogramu odpovídá jedné ze složek směsi, pokud je zkoumaná směs dobře rozdělena. Poloha píku na ose x je uváděna pomocí retenčního času (určení podle polohy vrcholu), určuje, o jakou látku se jedná (kvalitativní analýza), plocha píku (nebo jeho výška) určuje koncentraci látky ve směsi (kvantitativní analýza). Základní charakteristiky chromatogramu se většinou vztahují k eluční metodě jako nejrozšířenější analytické chromatografické metodě.[5]

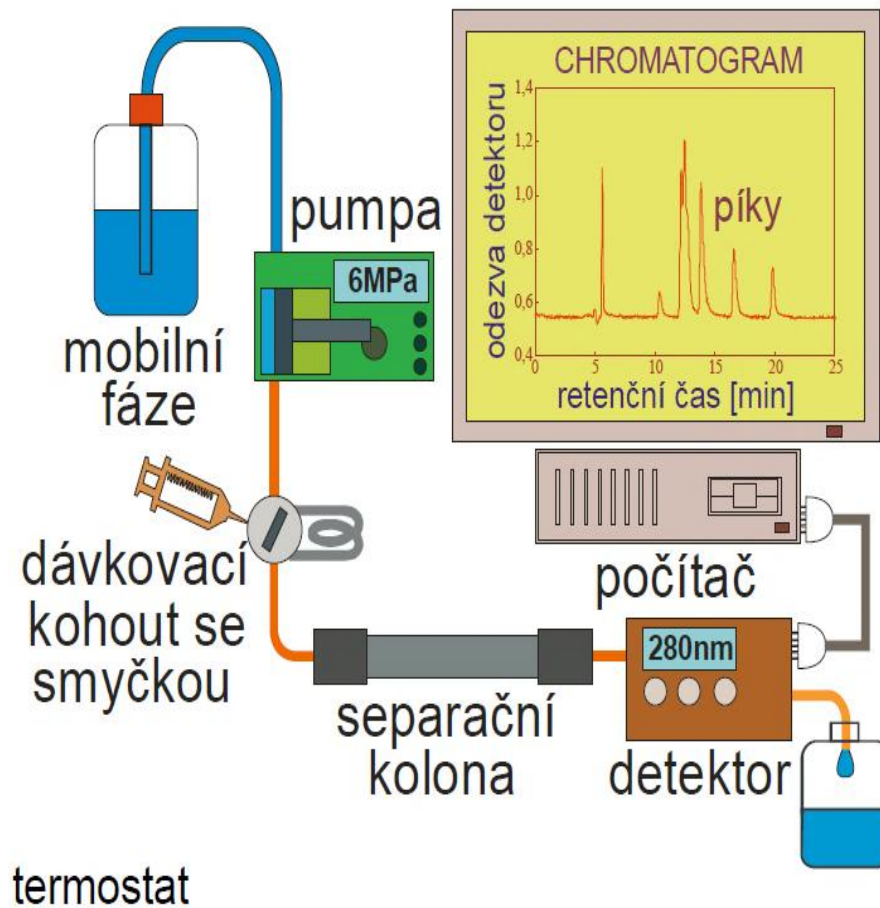


Obr. 7: Chromatogram složený ze tří látek (píků)[13]

1.3.15 Kapalinová chromatografie (LC)

Kapalinová chromatografie (LC) je jedna z chromatografických separačních (dělicích) metod. Ve které je mobilní fází kapalina a stacionární fází pevná látka (LSC), nebo nemísitelná kapalina zakotvená na pevném nosiči (LLC). Mezi metodami kapalinové chromatografie má významné místo HPLC (vysokoúčinná kapalinová chromatografie,

nebo vysokotlaká kapalinová chromatografie). Kapalinový chromatograf tvoří zásobníky s mobilní fází, vysokotlaká pumpa, dávkovač, kolona a detektor.



Obr. 8: Schéma kapalinového chromatografu[14]

2 VYUŽITÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE

Využívají ji forenzní kriminalisté, výzkumné ústavy, potravinářské laboratoře, geologické laboratoře, biologické laboratoře, výzkumné ústavy a jiné. Převážně k analýze těkavých látek. Adsorpční princip je používán pro dělení permanentních plynů, výfukové plyny, bioplyn. Rozdělovací princip při kontrole aromatických látek (parfémy, likéry, voňavky). Plynová chromatografie je hodně využívána při stanovení alkoholu v krvi, při forenzní toxikologické analýze, kontrole potravin, ropy, paliva, odpadních vod a jiné.

2.1 APLIKACE PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE (GC)

Možnost aplikace plynové chromatografie je omezena na látky plynné, snadno těkavé a látky těkavé po derivatizaci. Významné uplatnění plynová chromatografie nalézá v průmyslu organických syntéz. Umožňuje převést na těkavé produkty, kde umožní širší aplikace GC v biologických, biochemických a v lékařských oborech, např. analýza steroidů, lipidů, aminokyselin v tělních tekutinách. Standardně se využívá ke sledování kvality ovzduší. Aplikuje se v určení stopového množství pesticidů, herbicidů a insekticidů ve vodách, půdě, potravinách a kosmetických přípravcích. Dále v analýze ropných produktů, kde zájem ropného průmyslu od počátku podpořil rozvoj metodiky plynové chromatografie.

Významně se uplatňuje ve forenzní kriminalistice a v odhalování závažných trestných činů. Klinické a toxikologické monitorování obsahu drog a psychotropních látek v krvi. A široké veřejnosti známé stanovení alkoholu v krvi.

3 OMEGA 3 – PUFA NENASYCENÉ MASTNÉ KYSELINY

Omega – 3 nenasycené mastné kyseliny označované též PUFA omega – 3 je skupina nenasycených mastných kyselin, ale tělo si je nedovede vyrobit. Přijímají se formou potravy. Jsou obsaženy v tučných rybách, jako jsou sardinky, losos, tuňák a jiné. Významné jsou pro činnost mozku, jako je paměť a jeho výkon. Snižují riziko kardiovaskulárních onemocnění. Jejichž společným rysem je dvojná vazba mezi uhlíky na třetím místě v jejich řetězci. Mají nepostradatelnou funkci v těle, která může zabránit příznakům nemocí, jako jsou srdeční problémy, únava, onemocnění kůže, špatná paměť, poruchy prokrvení či změny nálad.

3.1 MASTNÉ KYSELINY

Mastné kyseliny jsou karboxylové kyseliny s alifatickým (organickým) řetězcem, který může být nasycený bez dvojných vazeb, nebo nenasycený s dvojnými vazbami. Nenasycené mastné kyseliny se dále dělí podle stupně nasycení na:

- mononenasycené MUFA, které obsahují jednu dvojnou vazbu
- polynenasycené PUFA, které obsahují dvě a více dvojných vazeb
- HUFA, vysoce nenasycené mastné kyseliny s 20 a více atomy uhlíku a se třemi a více dvojnými vazbami

II. PRAKTICKÁ ČÁST

4 ANALÝZA PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE

V současné době je analýza plynové chromatografie nezbytně nutná. Ukazuje se, že uživatelů drog a alkoholu je stále více. S jejich zvyšujícím se výskytem hrozí i užívání drog u řidičů, pilotů atd. Nejčastěji se používají testy na přítomnosti drog ve slinách. Analýzy, které vyžadují jiný druh vzorku (krev, moč) je možné provést v laboratoři po odběru lékařem. Nezanedbatelné je využití plynové chromatografie ve forenzní kriminalistice při vyšetřování závažných trestných činů.

4.1 ZADÁNÍ ANALÝZY

Vypracování chemické analýzy vzorku obsahující biologický materiál zakopaný v půdě, ze kterého budeme analyzovat Omega – 3 nenasycené mastné kyseliny metodou plynové chromatografie. Z analyzovaných látek jsem si především vybrala, hexanoic acid, octanoic acid, decanoic acid, dodecanoic acid, methyl tetradecanoate, hexadecanoic acid, octadecanoic acid, 9-octadecenoic acid, cyclopropanoic acid a provedeme identifikaci nalezených látek ve vzorku A, B, C z čistě teoretické analýzy a verifikace.

4.2 Vypracování analýzy

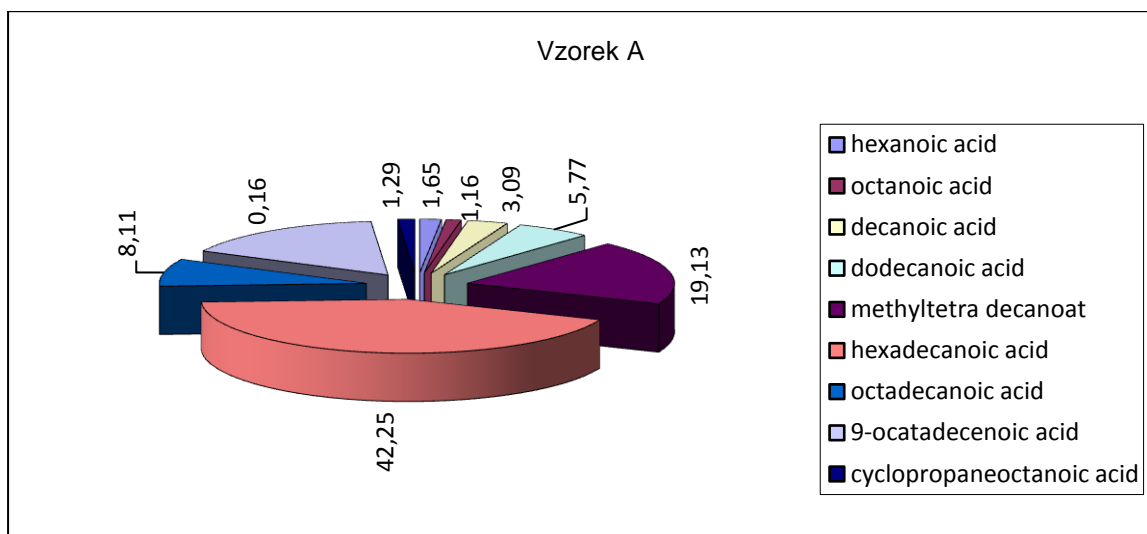
K detekování nám bude sloužit plamenoionizační detektor, který je vhodný pro sledování organických látek a funguje na principu ionizace organických látek v plameni. Kvalitativní analýzou vzorku určíme složení vzorku a zjištění, ze kterých složek se vzorek skládá. Kvantitativní analýzou určíme množství nebo koncentraci jednotlivých složek ve vzorku. Vzorky biologického materiálu vzorek A- 20, vzorek B – 40 cm, vzorek C – 60 cm, jsme nastříkaly injekční stříkačkou do dávkovacího zařízení chromatografu. Nastříknutí vzorku přes septum do přístroje na začátek chromatografické kolony. Po průchodu kolonou vstoupil vzorek do detektoru a v zapisovači zaznamenal píky jednotlivých látek přítomných ve vzorku. Podmínky analýzy jsme optimalizovaly tak, aby všechny píky byly dobře vyhodnotitelné a dostatečně separované. Konkrétním organickým látkám jsme přiřadily jednotlivé píky na základě retenčních časů.

4.2.1 Identifikace organických látek přítomných ve vzorku A

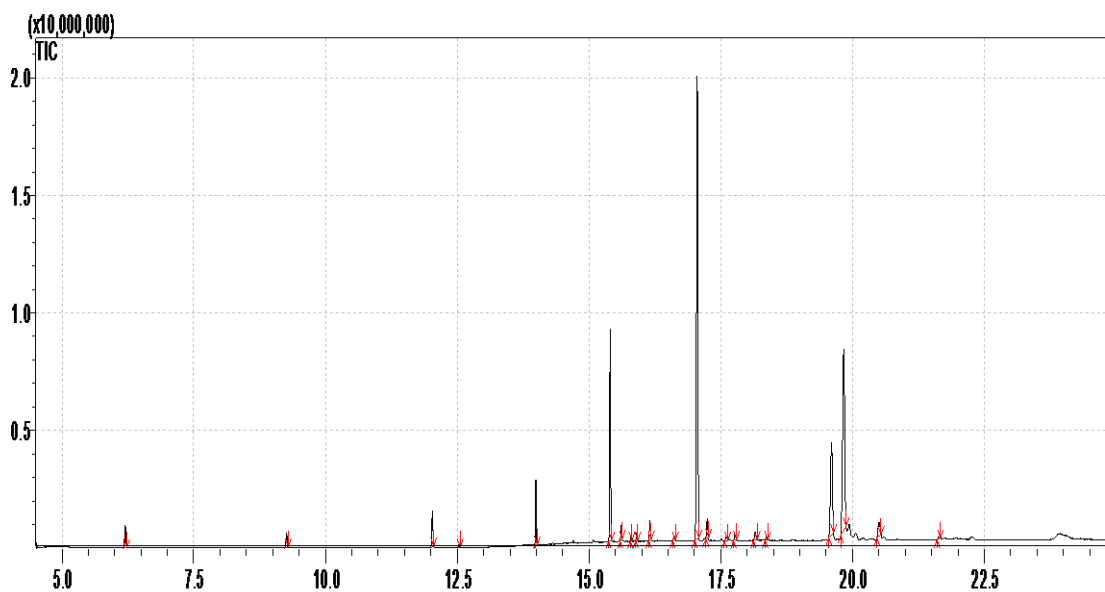
Analýza vzorku A zakopaného 20 cm v půdě.

Tabulka 1: Naměřené hodnoty vzorku A[vlastní zpracování]

A_01						
čas	odchylka	hodnota	odchylka	procenta	odchylka	
6.200	0,004	924748	35367	1,81825	0,07134	hexanoic acid
9.261	0,001	612038	-11947,3	1,20340	-0,02187	octanoic acid
12.028	0,003	1552132	-62989	3,05182	-0,11831	decanoic acid
13.994	0,001	2788021	-161732	5,48184	-0,30794	dodecanoic acid
15.401	0,001	9006269	-531184	17,70825	-1,01041	methyl tetradecanoate
17.052	0,000	19733352	-888397	38,79998	-1,67434	hexadecanoic acid
19.600	0,002	3923895	-62700,3	7,71522	-0,10952	octadecanoic acid
19.834	0,003	7672633	-130269	15,08604	-0,23076	9-octadecenoic acid
20.505	0,002	588214	-9422,67	1,15655	-0,01651	cyclopropaneoctanoic acid
A_02						
6.193	-0,003	893351	3970	1,77837	0,03146	hexanoic acid
9.259	-0,001	628870	4884,667	1,25187	0,02661	octanoic acid
12.024	-0,001	1574421	-40700	3,13416	-0,03597	decanoic acid
13.992	-0,001	2905318	-44435	5,78354	-0,00625	dodecanoic acid
15.399	-0,001	9319526	-217927	18,55213	-0,16653	methyl tetradecanoate
17.051	-0,001	20061018	-560731	39,93492	-0,53940	hexadecanoic acid
19.596	-0,002	3828983	-157612	7,62225	-0,20248	octadecanoic acid
19.829	-1,002	7581713	-221189	15,09271	-0,22408	9-octadecenoic acid
20.500	-0,003	576526	-21110,7	1,14767	-0,02539	cyclopropaneoctanoic acid
A_03						
6.194	-0,002	850044	-39337	1,64410	-0,10281	hexanoic acid
9.260	0,000	631048	7062,667	1,22053	-0,00474	octanoic acid
12.024	-0,001	1718810	103689	3,32441	0,15428	decanoic acid
13.992	-0,001	3155920	206167	6,10398	0,31419	dodecanoic acid
15.400	0,000	10286564	749111	19,89560	1,17694	methyl tetradecanoate
17.052	0,000	22070877	1449128	42,68805	2,21374	hexadecanoic acid
19.598	0,000	4206908	220312,7	8,13673	0,31200	octadecanoic acid
19.830	-0,001	8154359	351457,3	15,77163	0,45484	9-octadecenoic acid
20.503	0,000	628170	30533,33	1,21497	0,04190	cyclopropaneoctanoic acid



Graf 1: Prostorové zpracování vzorku A[vlastní zpracování]



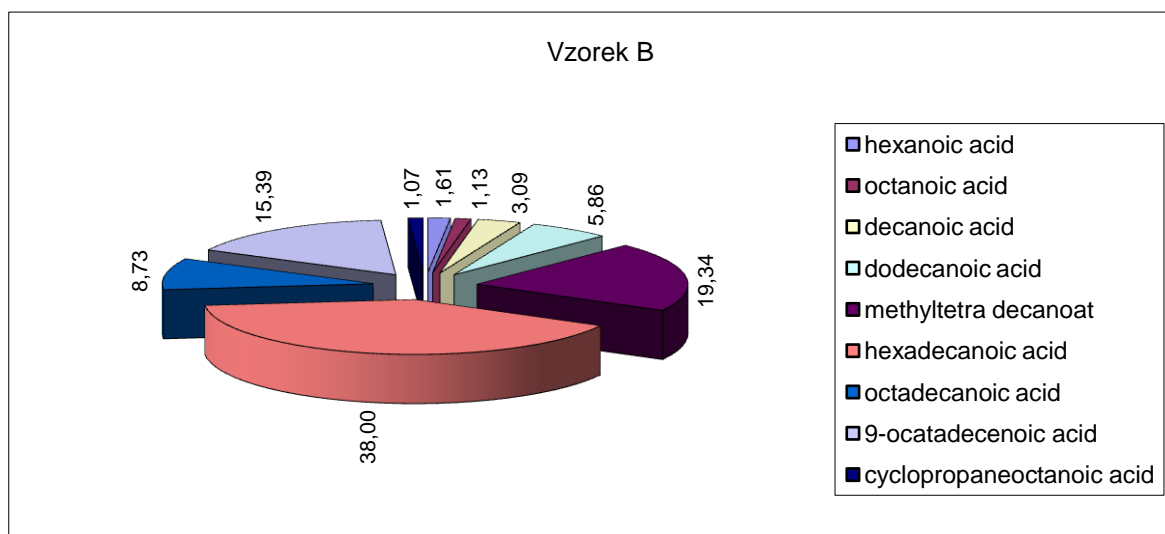
Obr. 9: Chromatogram naměřených píků vzorku A[vlastní zpracování]

4.2.2 Identifikace organických látek přítomných ve vzorku B

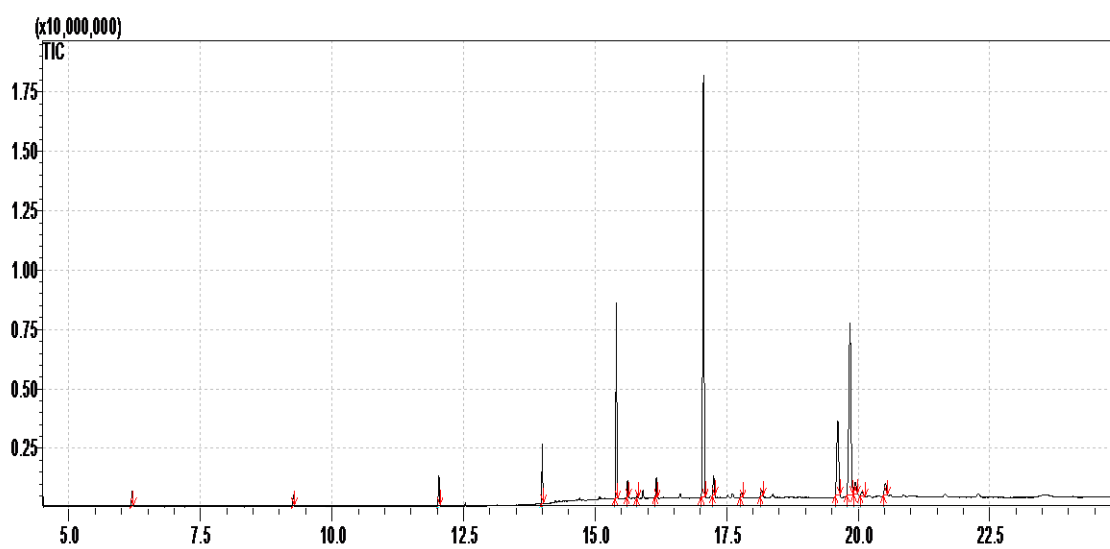
Analýza vzorku B zakopaného 40 cm v půdě.

Tabulka 2: Naměřené hodnoty vzorku B[vlastní zpracování]

B_01						
6,200	0,003	647035	-19324,3	1,42839	-0,14305	hexanoic acid
9,266	0,003	469688	-16171,7	1,03688	-0,10842	octanoic acid
12,032	0,003	1263311	-38678	2,78887	-0,27939	decanoic acid
13,999	0,003	2489746	34396,67	5,49634	-0,27587	dodecanoic acid
15,407	0,003	8238329	151938,3	18,18685	-0,81686	methyl tetradecanoate
17,061	-0,845	17772202	5354820	39,23373	9,91496	hexadecanoic acid
19,612	-0,071	3137850	-1403535	6,92709	-3,71767	octadecanoic acid
19,846	-0,217	7205438	2386431	15,90665	4,51248	9-octadecenoic acid
19,947	-0,374	492288	167549,3	1,08677	0,31707	cyclopropanedecanoic acid
B_02						
6,196	-0,001	676851	10491,67	1,71674	0,14530	hexanoic acid
9,260	-0,003	485624	-235,667	1,23172	0,08642	octanoic acid
12,027	-0,002	1291712	-10277	3,27625	0,20799	decanoic acid
13,994	-0,002	2296253	-159096	5,82413	0,05191	dodecanoic acid
15,402	-0,002	7493763	-592628	19,00688	0,00318	methyl tetradecanoate
17,053	-0,853	16250796	3833414	41,21788	11,89910	hexadecanoic acid
19,601	-0,082	2997795	-1543590	7,60349	-3,04127	octadecanoic acid
19,833	-0,230	6701590	1882583	16,99765	5,60348	9-octadecenoic acid
20,506	0,185	481928	157189,3	1,22234	0,45264	cyclopropanedecanoic acid
B_03						
6,196	-0,001	675192	8832,667	1,56918	-0,00225	hexanoic acid
9,262	-0,001	502267	16407,33	1,16730	0,02200	octanoic acid
12,028	-0,001	1350944	48955	3,13967	0,07140	decanoic acid
13,995	-0,001	2580049	124699,7	5,99617	0,22396	dodecanoic acid
15,403	-0,001	8527080	440689,3	19,81739	0,81368	methyl tetradecanoate
17,056	-0,850	18125092	5707710	42,12368	12,80490	hexadecanoic acid
19,604	-0,079	3229149	-1312236	7,50471	-3,14004	octadecanoic acid
19,837	-0,226	7488510	2669503	17,40369	6,00952	9-octadecenoic acid
20,511	0,190	549994	225255,3	1,27822	0,50851	cyclopropanedecanoic acid



Graf 2: Prostorové zpracování vzorku B[vlastní zpracování]



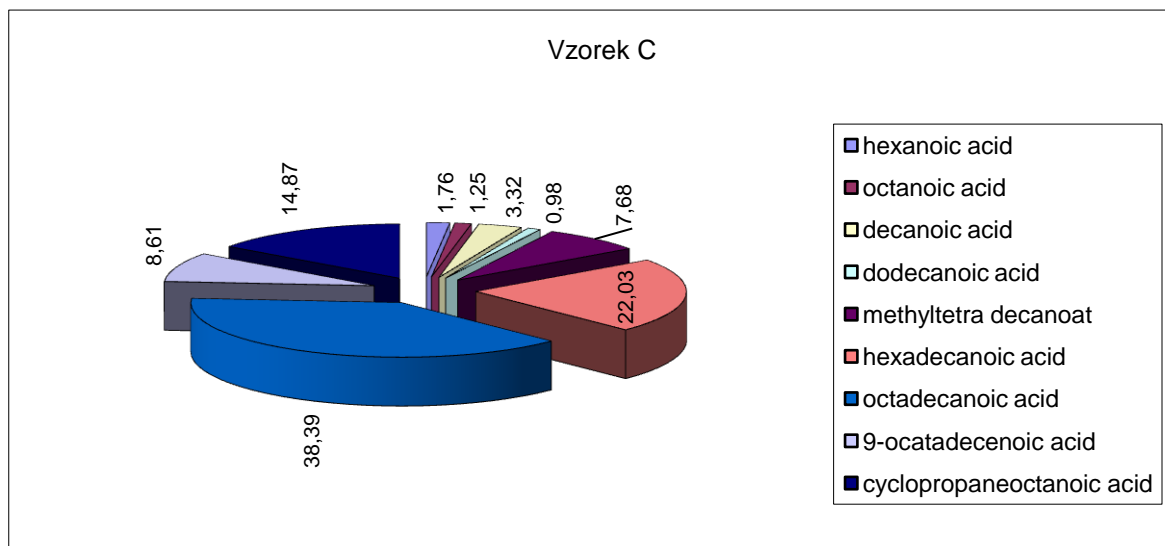
Obr. 10: Chromatogram naměřených píků vzorku B[vlastní zpracování]

4.2.3 Identifikace organických látek přítomných ve vzorku C

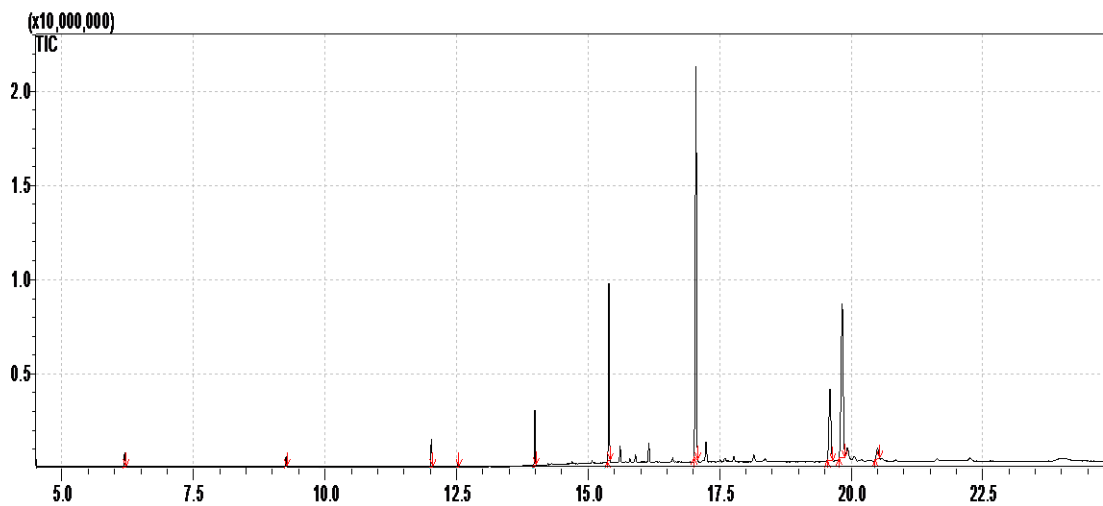
Analýza biologického vzorku C zakopaného 60 cm v půdě.

Tabulka 3: Naměřené hodnoty vzorku C[vlastní zpracování]

C_01						
6,193	-0,001	800002	2885,333	1,64086	0,00472	hexanoic acid
9,259	-0,001	539256	-26415	1,10605	-0,05483	octanoic acid
12,024	-0,001	1485107	-93186	3,04606	-0,19351	decanoic acid
13,992	0,974	2932600	1842718	6,01498	3,77952	dodecanoic acid
15,399	0,938	9422252	4283613	19,32573	8,78324	methyl tetradecanoate
17,052	1,102	20862898	7576199	42,79133	15,53044	hexadecanoic acid
19,599	1,698	3787301	-80065	7,76803	-23,19784	octadecanoic acid
19,831	0,156	8204958	3046309	16,82897	6,24445	9-octadecenoic acid
20,504	0,449	569908	-5031362	1,16892	-10,32663	cyclopropanedecanoic acid
C_02						
6,195	0,001	805126	8009,333	1,67706	0,04092	hexanoic acid
9,260	0,000	574504	8833	1,19668	0,03580	octanoic acid
12,025	0,000	1640834	62541	3,41783	0,17825	decanoic acid
12,531	-0,487	159376	-930506	0,33198	-1,90348	dodecanoic acid
13,992	-0,469	2944891	-2193748	6,13416	-4,40833	methyl tetradecanoate
15,399	-0,551	9341208	-3945491	19,45758	-7,80331	hexadecanoic acid
17,052	-0,849	20479281	5392193	42,65799	11,69212	octadecanoic acid
19,597	-0,078	3592638	-1566011	7,48340	-3,10112	9-octadecenoic acid
19,831	-0,224	7949174	2347904	16,55799	5,06244	cyclopropaneoctanoic acid
C_03						
6,195	0,001	786222	-10894,7	1,59050	-0,04564	hexanoic acid
9,260	0,000	583253	17582	1,17990	0,01902	octanoic acid
12,025	0,000	1608938	30645	3,25483	0,01526	decanoic acid
12,530	-0,488	177670	-912212	0,35942	-1,87604	dodecanoic acid
13,991	-0,470	3048773	-2089866	6,16757	-4,37491	methyl tetradecanoate
15,399	-0,551	9655990	-3630709	19,53376	-7,72713	hexadecanoic acid
17,051	-0,850	20994683	5907595	42,47158	11,50571	octadecanoic acid
19,597	-0,078	3678350	-1480299	7,44119	-3,14333	9-octadecenoic acid
19,829	-0,226	8284728	2683458	16,75974	5,26419	cyclopropaneoctanoic acid



Graf 3: Prostorové zpracování vzorku C[vlastní zpracování]



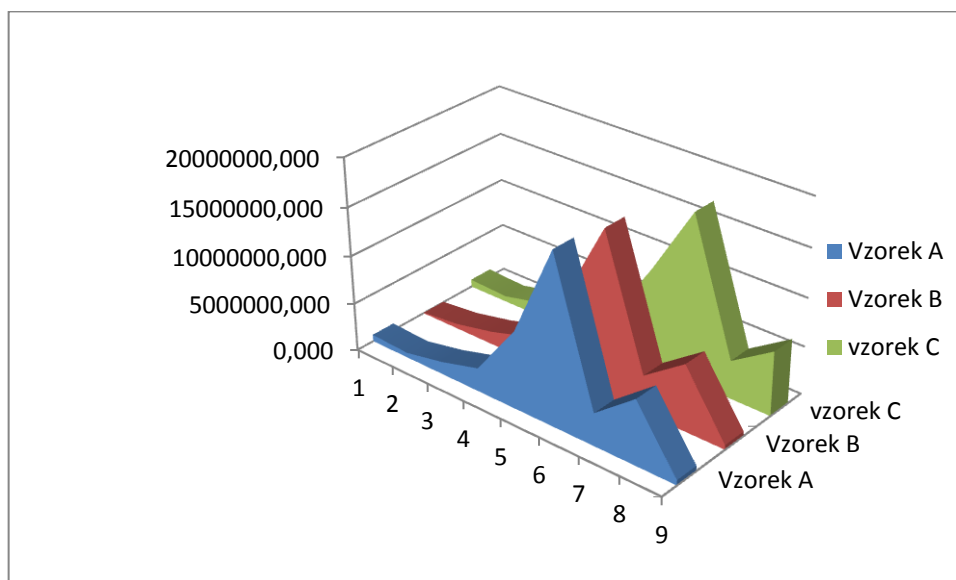
Obr. 11: Chromatogram naměřených piků vzorku C[vlastní zpracování]

4.2.4 Procentuální zastoupení sloučenin ve vzorku

Shrnutí teoretické analýzy mononenasycených mastných kyselin omega – 3 vzorků A, B, C.

Tabulka 4: Shrnutí analyzovaných vzorků A, B, C[vlastní zpracování]

	Vzorek A	Vzorek B	Vzorek C
hexanoic acid	1,654	1,614021444	1,758896396
octanoic acid	1,157	1,130786185	1,254911213
decanoic acid	3,086	3,090002102	3,323697517
dodecanoic acid	5,771	5,862840761	0,984306875
methyl tetradecanoate	19,125	19,33538686	7,675495773
hexadecanoic acid	42,245	38,00274496	22,03010652
octadecanoic acid	8,105	8,731449081	38,3893475
9-octadecenoic acid	16,042	15,38768531	8,61024002
cyclopropaneoctanoic acid	1,294	1,074523689	14,87458167



Graf 4: Shrnutí analyzovaných vzorků A, B, C[vlastní zpracování]

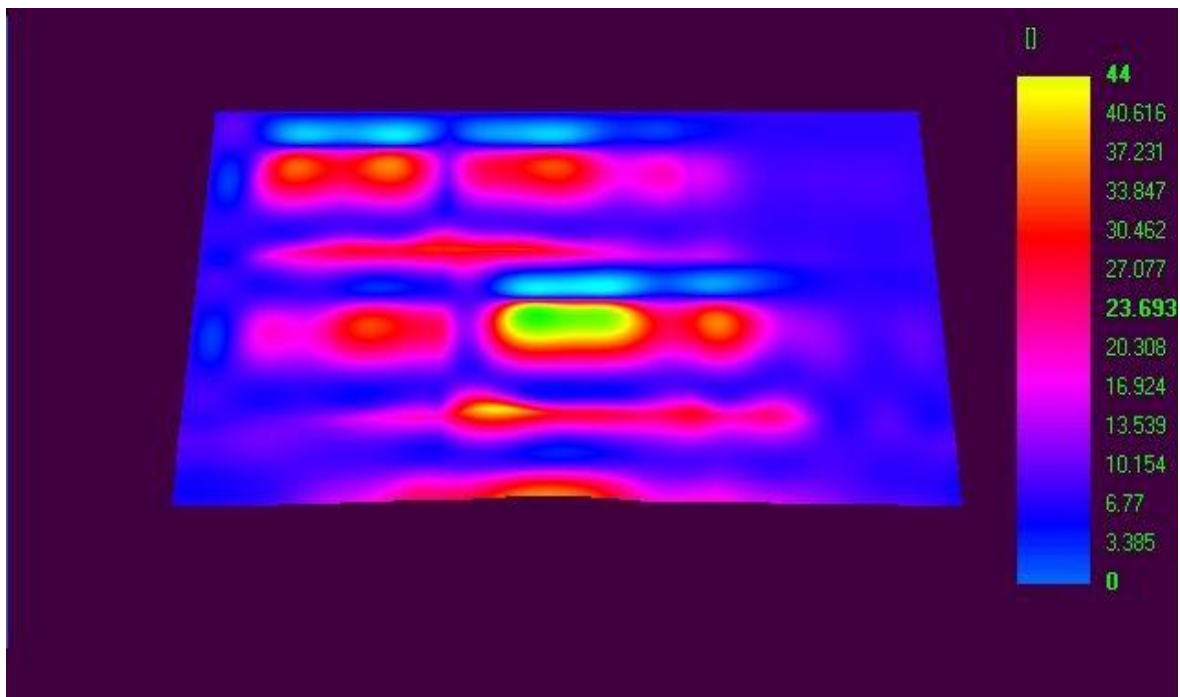
4.2.5 Vyhodnocení analýzy

Chemickou analýzou plynové chromatografie jsem verifikovala informace při použití biologického materiálu zakopaného v půdě z čistě teoretického hlediska. Seznámila jsem se s problematikou forenzní kriminalistiky a forenzních věd. Která je při odhalování trestných činů nezbytná. A obohatila moje znalosti této forenzní vědy. Kterou bych chtěla

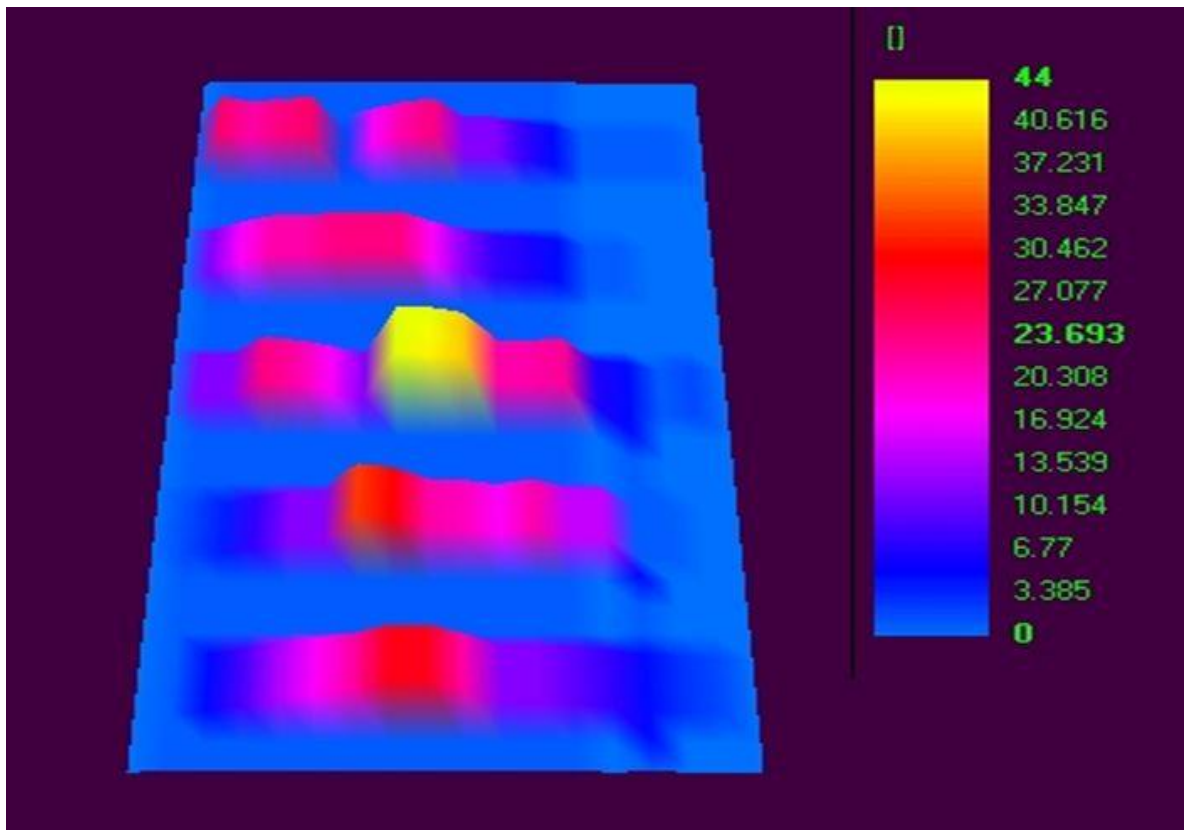
dál rozvíjet a v dané oblasti pokračovat při psaní diplomové práce. Verifikací plynové chromatografie jsem zjistila, jaké složení obsahuje biologický materiál, a jaké hodnoty jsem naměřila ve vzorcích biologického materiálu omega 3 mononenasyčených mastných kyselin. Naměřené vzorky obsahovali devět převážně chemických látek, které obsahoval zkoumaný biologický materiál, a jsou to hexanoic acid, octanoic acid, decanoic acid, dodecanoic acid, methyl tetradecanoate, hexadecanoid acid, octadecanoid acid, 9-octadecenoic acid a cyclopropaneooctanoic acid.

4.2.6 Naměřené hodnoty v 3D vertexu

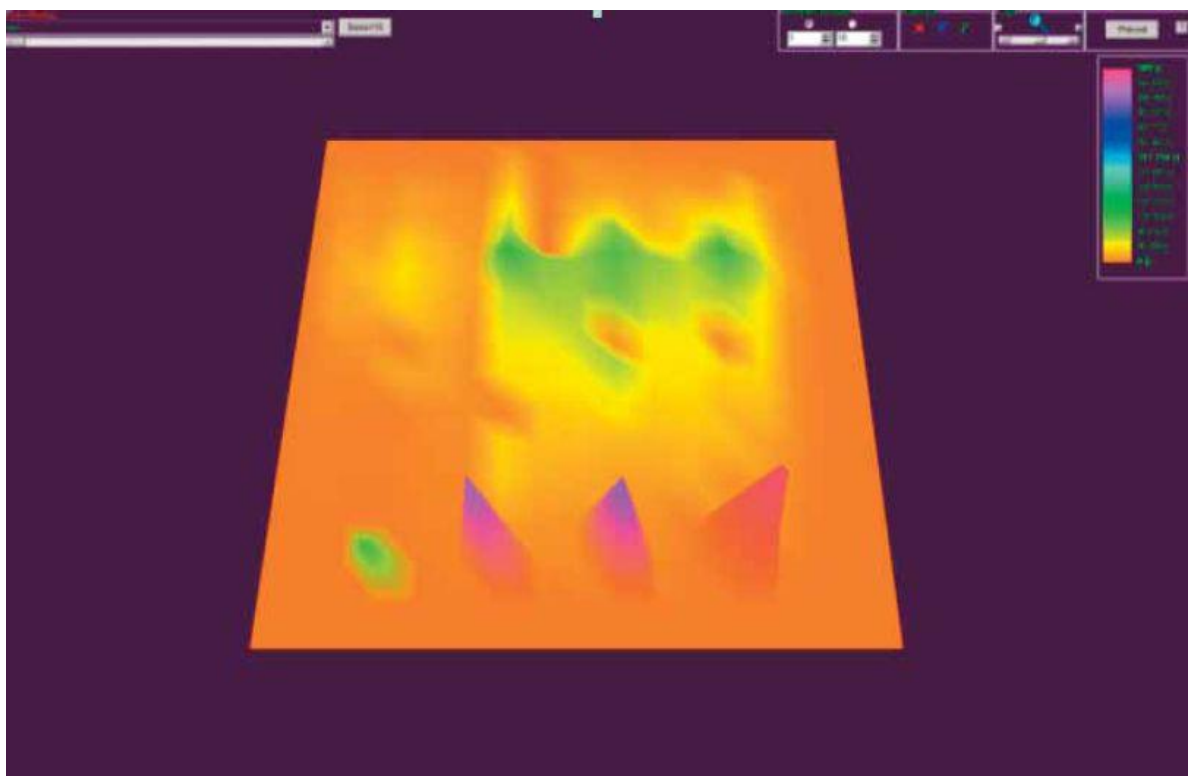
Naměřené hodnoty vzorků A, B, C plynovou chromatografií v 3D prostoru nazýváme vrcholem (vertexem), které jsou spojené s celou řadou parametrů, kdy je nejdůležitější zvolení souřadnic a dalších parametrů pro potřeby 3D aplikace. Konečné rozlišení naměřených vertex hodnot v barevném 3D prostoru.



Obr. 12: Naměřené body vertexové hladiny v 3D prostoru[vlastní zpracování]



Obr. 13: Naměřené body vertexové hladiny v 3D prostoru[vlastní zpracování]

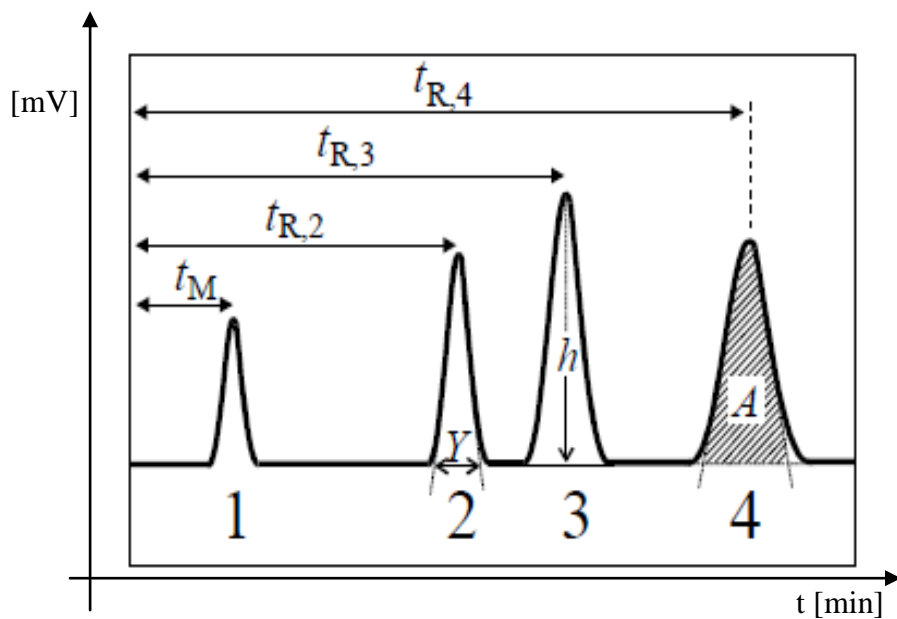


Obr. 14: Naměřené body vertexové hladiny v 3D prostoru[vlastní zpracování]

4.2.7 Záznam chromatogramu

Ze získaných chromatogramů lze vyhodnotit retenční parametry separovaných látek jednotlivých signálů, parametry výšky píků a plochy atd.

- **retenční čas t_R** - představuje časový interval od nástřiku vzorku do okamžiku detekce odpovídající a maximální koncentrace detektorem, a je odečítán z chromatogramu jako vzdálenost mezi okamžikem nástřiku a maximem příslušného chromatografického píku.
- **mrtvý retenční čas kolony t_M** – představuje časový interval od začátku nástřiku vzorku do okamžiku detekce maximální koncentrace složky, jež není stacionární fází zadržována a pohybuje se rychlostí toku mobilní fáze.
- **šířka chromatografického píku** – je odečítání této hodnoty na úrovni základní linie (hodnota Y) způsobem naznačeným u komponenty 2, kdy vzestupná a sestupná část píku je extrapolována tečnami. Alternativně je možno šířku chromatografického píku odečítat v polovině výšky (hodnota $Y_{1/2}$) nebo v inflexi, jež pro pík Gaussovského tvaru leží v 0,607 násobku jeho výšky (tzv. hodnota 2σ). Je běžné udávat šířku chromatografického píku v časových jednotkách.
- **výška h , a plocha A chromatografického píku** – v chromatogramu nese kvantitativní informaci o analyzované látce (jaké množství analytu je obsaženo ve vzorku)
- **w** – je šířka píku při základně
- **$h/2$ ($w_{1/2}$)** – je polovina výšky píku (šířka píku v polovině jeho výšky)
- **redukovaný retenční čas se vypočte vzorcem t'_R : $t'_R = t_R - t_M$**
- **retenční faktor k** – vyjadřuje míru interakce tohoto analytu se stacionární fází.



Obr. 15: Základní uspořádání kolonového chromatogramu, t_M – mrtvý čas kolony, t_R – retenční čas složky vzorku, Y – šířka píku při základně, h – výška píku, A – plocha píku[2]

5 BUDOUCNOST PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE

Plynová chromatografie se neustále vyvíjí a její zastoupení není opomenutelné ve vývoji nanovláken, kde byly sledované vlastnosti v různých fázích tepelného ošetření pomocí inverzní plynové chromatografie. Která mohou být použita například v automobilovém průmyslu, k výrobě neprůstřelných vest a jiné. Možnosti vybudování vědeckého centra jako zdroje nových poznatků v oblasti výzkumu a vývoje medicíny, forenzní kriminalistiky, nanotechnologií, optických technologií, analytických procesů, v biologii a v jiných odvětví výzkumu. Značná část výzkumu bude také věnována studiu zdravotních rizik ve vztahu k člověku a životnímu prostředí. V současné době se neobejde testování alkoholu plynovou chromatografií na přítomnost metylalkoholu a tanečních drog, které jsou dostupné na trhu a mají zničující charakter.

ZÁVĚR

Zvolená metoda plynové chromatografie, která patří mezi separační metody, pracuje s plynnou mobilní fází a je založena na distribuci látek mezi dvě nemísitelné fáze mobilní a stacionární. Stacionární fáze je obsažena v koloně a mobilní fáze je nosný plyn, který se pohybuje skrz, nebo podél stacionární fáze. Její použití ve forenzní kriminalistice má nezanedbatelné místo a proto jsem volila tuto metodu jako názorný příklad a přiblížení práce chemických odborníků, kteří dnes a denně přicházejí s touto metodou do styku.

V dnešním světě při odhalování trestných činů a jejich pachatelů používá policie řadu metod. I když je forenzní kriminalistika považována za téměř mladou vědní disciplínu, je jednou z těch vědních metod, které denně pomáhají kriminalistům při řešení složitých trestných činů, někdy i neřešitelných. Metoda plynové chromatografie studuje patologicko-anatomické změny, které vznikají účinkem jedu a provádí analýzu v biologickém materiálu. Tato metoda je použitelná především při zkoumání nátěrových hmot, screening omamných a psychotropních látek, technických příčin požárů a k řešení závažných trestných činů.

Forenzní kriminalistika se neustále rozvíjí a jde dopředu. Čerpá poznatky z různých oblastí vědních oborů a přírodních věd. Při analytických rozborech se využívá především metod spektrometrické a separační. Neustálé vyvíjení a zdokonalování této chromatografické metody napomáhá při objasňování trestních skutků, které v minulých letech nebylo možné objasnit.

Forenzní pracovníci, kteří spolupracují při vyšetřování prováděním chemických analýz, mají významný podíl při odhalování pachatelů trestných činů.

ZÁVĚR V ANGLIČTINĚ

The selected method of gas chromatography, which is one of separation methods, is working with gaseous mobile phase and is based on the distribution of substances between two immiscible phases of mobile and stationary. The stationary phase is contained in a column and the mobile phase is a carrier gas which moves through or along the stationary phase. Its use in forensic criminology has a significant place and that is why I chose this method as an example to illustrate the work of chemical experts who come into contact with this method on daily basis.

In today's world, the police use a variety of methods in the detection of crimes and the perpetrators. Although forensic criminology is considered to be a young scientific discipline, it is one of those scientific methods that help criminologists daily to solve complex crimes, sometime unsolvable. The gas chromatography method studies pathological anatomical changes that arise from the effect of poison, and performs analysis in biological material. This method is useful especially when examining coatings, screening of narcotic and psychotropic substances, the technical causes of fires, and when solving serious crimes.

Forensic criminology is continually evolving and moving forward. It draws knowledge from different disciplines and areas of natural sciences. During analytical analyzes, spectrometric and separation methods are mainly used. The ongoing development and improvement of this chromatographic methods helps to solve criminal cases, which were not possible to decipher in the past years.

Forensic experts, who collaborate in investigations of criminal cases by implementing the chemical analysis, contribute significantly towards the detection of perpetrators of criminal offenses.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] BALÍKOVÁ, Marie. *Forenzní a klinická toxikologie*. Dotisk 1. Vydání. Praha : Nakladatelství Galén Praha : tiskárna Glos, Copyright © Galén, 2004, 2007. s. 58. ISBN 978-80-7262-284-9
- [2] OPEKAR, František; JELÍNEK, Ivan; RYCHLOVSKÝ, Petr; PLZÁK, Zbyněk. *Základní analytická chemie*. Praha : 2002. s. 157.
- [3] PURNELL, Howard. *Plynová Chromatografie*. Praha : SNTL nakladatelství technické literatury, 1966. s. 93.
- [4] SMOLKOVÁ, Eva. *Plynová chromatografie*. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1979. s. 37
- [5] SMOLKOVÁ, Eva. *Plynová chromatografie II. Instrumentální část*. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1975. s. 32
- [6] ŠŤASTNÁ, Sylvie a kolektiv; *Přehled vyšetření metabolitů pro diagnostiku dědičných metabolických poruch*. 1. vydání. Praha : Vydavatelství Ústav dědičných metabolických poruch VFN a 1. LF UK Praha : Tiskárna Edit, spol. s.r.o. s. 12. ISBN 978-80-904219-0-5.
- [7] *Nlm.Nih.gov* [online]. 2013 [cit. 2013-03-24]. Mathieu Orfila. Dostupné z WWW: http://www.nlm.nih.gov/visibleproofs/media/detailed/ii_a_202.jpg
- [8] *Amazon.com* [online]. 2013 [cit. 2013-03-24]. William Marvin Bass. Dostupné z WWW: http://www.amazon.com/Jefferson-Bass/e/B001IGOUJ2/ref=ntt_athr_dp_pel_1
- [9] *Technet.idnes.cz* [online]. 2013 [cit. 2013-03-24]. Dokonalý jed. Dostupné z WWW: http://technet.idnes.cz/foto.aspx?foto1=FUR25304a_7293_lores.jpg
- [10] *En.wikipedia.org* [online]. 2013 [cit. 2013-03-24]. Gas chromatography. Dostupné z WWW: http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/8/87/Gas_chromatograph.png
- [11] *Pension-sankt-urban.de* [online]. 2013 [cit. 2013-03-24]. The split/splitless injector. Dostupné z WWW: <http://pension-sankt-urban.de/wpimages/split-splitless-injector>

- [12] *Equipcoservices.com* [online]. 2013 [cit. 2013-03-24]. The flame ionization detector. Dostupné z WWW: <http://www.equipcoservices.com/support/tutorials/introduction-to-flame-ionization/>
- [13] *Sk.Wikipedia.org* [online]. 2013 [cit. 2013-03-24]. Plynová chromatografie. Dostupné z WWW: <http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/4/40/Chromatogram.png>
- [14] *Cesmina.vscht.cz* [online]. 2013 [cit. 2013]. Schéma kapalinového chromatografu. Dostupné z WWW: http://cesmina.vscht.cz/trp/data/soubory/61_skupinova-analyza-motorovych-naft-mag.pdf

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

PUFA	Nenasycené mastné kyseliny
MUFA	Mononenasycené mastné kyseliny
HUFA	Vysoce nenasycené mastné kyseliny
GC	Plynová chromatografie
LC	Kapalinová chromatografie
LSC	Adsorpční kapalinová chromatografie
LLC	Rozdělovací kapalinová chromatografie
IEC	Iontově výměnná chromatografie
GPC	Gelová chromatografie
AC	Afinitní chromatografie
TLC	Chromatografie na tenké vrstvě
PC	Papírová chromatografie
A/D	analogově – digitální převodník
TCD	Tepelně vodivostní detektor
FID	Plamenový ionizační detektor
AFID	Plamenový ionizační detektor s alkalickým kovem
ECD	Detektor elektronového záchytu
HeD	Heliový ionizační detektor
MS	Hmotnostně spektrometrický detektor
HPCL	Vysokoučinná kapalinová chromatografie

SEZNAM OBRÁZKŮ

Obrázek 1: Mathieu Orfila[7].....	12
Obrázek 2: William Marvin Bass[8].....	12
Obrázek 3: Chromatografický přístroj[9].....	13
Obrázek 4: Schéma plynového chromatografu[10].....	16
Obrázek 5: Schéma nástřikového portu[11].....	18
Obrázek 6: Schéma plamenového ionizačního detektoru[12].....	20
Obrázek 7: Chromatogram složený ze čtyř látek (píků)[13].....	21
Obrázek 8: Schéma kapalinového chromatografu[14].....	22
Obrázek 9: Chromatogram naměřených píků vzorku A[vlastní zpracování].....	28
Obrázek 10: Chromatogram naměřených píků vzorku B[vlastní zpracování].....	30
Obrázek 11: Chromatogram naměřených píků vzorku C[vlastní zpracování].....	32
Obrázek 12: Naměřené body vertexové hladiny v 3D prostoru[vlastní zpracování].....	34
Obrázek 13: Naměřené body vertexové hladiny v 3D prostoru[vlastní zpracování].....	35
Obrázek 14: Naměřené body vertexové hladiny v 3D prostoru[vlastní zpracování].....	35
Obrázek 15: Základní uspořádání kolonového chromatogramu, t_M – mrtvý čas kolony, t_R – retenční čas složky vzorku, Y – šířka píku při základně, h – výška píku, A – plocha píku[2]	37

SEZNAM TABULEK

Tabulka 1: Naměřených hodnot vzorku A[vlastní zpracování].....	27
Tabulka 2: Naměřených hodnot vzorku B[vlastní zpracování].....	29
Tabulka 3: Naměřených hodnot vzorku C[vlastní zpracování].....	31
Tabulka 4: Shrnutí analyzovaných vzorků A, B, C[vlastní zpracování].....	33

SEZNAM GRAFŮ

Graf 1: Prostorové zpracování vzorku A[vlastní zpracování].....	28
Graf 2: Prostorové zpracování vzorku B[vlastní zpracování].....	30
Graf 3: Prostorové zpracování vzorku C[vlastní zpracování].....	32
Graf 4: Shrnutí analyzovaných vzorků[vlastní zpracování].....	33