

ABSTRAKT

Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra Farmaceutické botaniky a ekologie

Kandidát **PharmDr. Tomáš Bílek**

Školitel **prof. RNDr. Luděk Jahodář, CSc.**

Název disertační práce **Využití GC a SPME v analýze přírodních látek**

Vzhledem k široké možnosti využití SPME a GC v analýze přírodních látek byl tento výzkum zaměřen v oblasti botaniky a ekologie na studium těkavých látek z rostlin.

Studovaným materiálem byly 2 druhy z čeledi Lamiaceae, *Melittis melissophyllum* L. subsp. *melissophyllum* a *Teucrium flavum* L. subsp. *flavum*. V teoretické části je jednak uvedena botanická a farmakognostická charakteristika čeledi Lamiaceae, resp. studovaných druhů a dále pojednání o těkavých látkách přírodního, rostlinného původu včetně chemické charakteristiky, biologické aktivity a způsobu jejich analýzy sensu lato.

Silice z kvetoucích nadzemních částí *Melittis melissophyllum* L. subsp. *melissophyllum*, rostoucího ve střední Itálii, byla získána destilací s vodní parou a charakterizována pomocí GC-FID a GC-MS. Bylo identifikováno 48 komponent (94,7 – 95,0 %). Hlavní složkou byl po houbách vonící 1-okten-3-ol (43,6 – 54,2 %). Výsledek by naznačoval možné využití rostliny jako nového přírodního zdroje této látky, používané např. v potravinářském průmyslu. Následným provedením headspace analýzy (HS-GC) bylo zjištěno, že tato aromatická sloučenina je v rostlině přítomna pouze v nízké koncentraci a její množství se zvyšuje destilací tohoto materiálu s vodní parou (SD).

Stále větší význam při analýze těkavých látek z rostlin, s ohledem na způsob vzorkování, má Headspace (HS) – Solid Phase Microextraction (SPME). Předmětem výzkumu bylo tedy vybrat nejúčinnější SPME vlákno, optimalizovat podmínky vzorkování a porovnat HS-SPME metodu s další extrakční technikou, destilací s vodní parou (SD). Na tomto základě, byla provedena analýza těkavých látek *Teucrium flavum* L. subsp. *flavum*, rostoucí ve střední Itálii, jak pomocí destilace s vodní parou (SD), tak headspace – solid phase microextraction (HS-SPME), ve spojení s GC / FID a GC / MS. V silici získané destilací s vodní parou bylo identifikováno 102 látek (99,0 – 99,3% všech složek analyzové silice). Nejvíce zastoupeny byly seskviterpenické uhlovodíky (48,5 – 49,4%), hlavní složkou po jablkách vonící (Z, E)- α -farnesen. Při HS-SPME analýze byly testovány tři typy vláken: 100 μ m polydimethylsiloxan (PDMS), 65 μ m PDMS / divinylbenzen (DVB) a 50/30 μ m DVB-carboxen-PDMS.

Nejvíce vyhovující se ukázalo být PDMS vlákno, použité za následujících podmínek: teplota 60°C, extrakční čas 30min, množství vzorku 30mg, velikost částic vzorku 1mm. HS-SPME metodou bylo identifikováno 76 (sušený vzorek) resp. 66 (čerstvý vzorek) různých těkavých látek (95,8 – 97,8%). Kromě toho bylo zjištěno, že přítomnost vody ve vzorku může zvýšit absolutní množství alkoholických látek, jako je 1-okten-3-ol a snížit přítomnost esterů, jako např. methyl geranat. Pomocí metody HS-SPME byly analyzovány jednak vzorky celé nadzemní části rostliny, jednak jednotlivé její části a to také v rámci jednoho květu. Ukázalo se, že co se týká těkavých látek, má největší příspěvek na rostlinnou vůni květní kalich. SPME technika tedy umožňuje také analýzu pouze cílené části rostliny s obsahem specifických látek. Tudiž může být vhodná pro odběr vzorku např. při průmyslovém využití aromatických rostlin či studiu na poli chemické ekologie.

Rostliny emitují těkavé organické sloučeniny, které hrají důležitou roli v jejich interakci s prostředím a mají zásadní dopad na chemii atmosféry. Rozvoj statické a dynamické techniky pro sběr těkavých látek z prostoru nad studovaným materiálem (headspace) v kombinaci s analýzou pomocí plynové chromatografie – hmotnostní spektrometrie může významně zlepšit naše chápání biosyntézy a ekologie těkavých rostlinných látek.