

ABSTRAKT (CZ)

Solvatační model (LSER) byl použit ke studiu retenčního chování látek v kapalinové a plynové chromatografii. V první kapitole byl studován popis retence 21 látek solvatačním modelem na reverzní stacionární fázi, v širokém rozmezí složení mobilní fáze methanol-voda a acetonitril-voda. Retence aromatických sloučenin byla obecně lépe popsána solvatačním modelem, než alifatických sloučenin.

Byl sledován vliv jednotlivých analytů, použitých pro formulaci LSER modelu, na celkovou schopnost popisu retence modelem. Odlišných výsledků v odhadu retence bylo dosaženo použitím regresního souboru látek obsahujícím pouze sloučeniny aromatické, nebo naopak jen alifatické. Rozdílné výsledky také poskytoval solvatační model formulovaný pouze z kyslíkatých derivátů, nebo naopak dusíkatých derivátů organických látek.

Druhá kapitola práce, tematicky zaměřená na plynovou chromatografii, se zabývala popisem retence 152 izomerů C5-C8 alkenů LSER modelem. Solvatační deskriptor L alkenů byl získán odhadovými metodami Havelec-Ševčík (HS) a Platts-Butina (PB), deskriptor E byl přímo vypočten podle jeho definice.

Na základě použitých metod k odhadu deskriptorů byly sestaveny dva modely k popisu retence alkenů, model HS a model PB. Byla zjištěna vyšší chyba odhadu retence pro *cis* izomery alkenů, počítané modelem HS. Po úpravě modelu HS odstraněním příspěvku pro *cis* interakce, bylo dosaženo významného zlepšení v popisu retence.

Oba modely byly použity k odhadu retence 59 alkenů C5-C7. Model HS s deskriptory $L_{HS \text{ no } cis}$ a E_{calc} poskytl přesnější popis retence, ve srovnání s modelem PB. Dále byla popisována retence skupiny 93 oktenů, nejlepších výsledků bylo dosaženo modelem PB pomocí deskriptorů L_{PB} a E_{calc} . Na závěr byla studována retence celé skupiny C5-C8 alkenů, kde se výrazněji projevovala heteroskedasticita reziduí u dvou-deskriptorových modelů. V případě jedno-deskriptorových modelů HS a PB nebyla heteroskedasticita jednoznačně prokázána. Nejlepší popis retence 152 alkenů s jediným deskriptorem L poskytl model HS.