

## Abstrakt

Vyhodnocování dat v kapilární zónové elektroforéze obvykle zahrnuje mnoho kroků, které vyžadují využití několika různých softwarů. Kromě vyhodnocení samotných elektroforeogramů je obvykle cílem získaná data dále zpracovávat, například fitováním vhodnou regresní funkcí za účelem získání fyzikálně-chemických parametrů separace (např. konstant stability komplexu analytu s přidáním komplexujícího činidla). Důležitá je také znalost přesnosti takového vyhodnocení (tj. chyby se kterou byly parametry stanoveny).

V rámci této práce byly implementovány nové části programu Eval, který původně sloužil pouze k vyhodnocování elektroforeogramů. Nově byla do programu přidána funkce automatického proložení píku analytu Haarhoff-van der Lindeho funkcí, která je řešením rovnice kontinuity v kapiláře při použití Diracovy funkce jako počáteční podmínky.

Velice častým jevem v kapilární elektroforéze je použití kompletačních činidel za účelem zlepšení separace. Z fyzikálně-chemického hlediska nás zajímají parametry, které tuto komplexaci charakterizují. Proto byla do programu Eval přidána možnost fitovat získané závislosti mobility na koncentraci komplexující látky rovnicí rektangulární hyperboly a pro získané regresní parametry vykreslit profilové diagramy, ze kterých je možné odečíst konfidenční interval na libovolné hladině spolehlivosti. Takto je možné fitovat i dvě série dat zároveň, což je výhodné např. v případě chirálních separací.

Pomocí programu Eval bylo vyhodnoceno několik již dříve zpracovaných měření, a pro tato data byly stanoveny konstanty stability a další parametry komplexace. Výsledky stanovené programem Eval se shodují s výsledky získanými při vyhodnocení programy Origin a statistickým softwarem R. Pro stanovené parametry byly navíc získány 95% intervaly spolehlivosti, které u komplikovanějších vyhodnocení nebyly předtím k dispozici.