

# Abstrakt

Univerzita Karlova  
Farmaceutická fakulta v Hradci Králové  
Katedra analytické chemie

Kandidát: Bc. Martina Procházková

Školitel: Doc. PharmDr. Hana Sklenářová, Ph.D.

Název diplomové práce: Využití Ramanovy spektrometrie pro analýzu vybraných směsí

Byla testována identifikace a stanovení obsahu methanolu a ethanolu pomocí Ramanovy spektroskopie. Pro toto testování byly připraveny dva typy kalibračních standardů. Objemy použitých chemikálií byly nastaveny tak, aby výsledná koncentrace alkoholů odpovídala 40 objemovým %. U prvního typu kalibrace se lišilo množství methanolu a ethanolu, v druhém případě bylo odlišné jen množství methanolu.

Měření probíhalo na disperzním přenosném Ramanově spektrometru s excitační vlnovou délkou laseru 785 nm. Byl testován vliv podmínek měření na linearitu získaných kalibračních závislostí při hodnocení intenzitou signálu a plochou daného pásu ve spektru. Takto byl testován vliv integračního času (1000 ms, 2500 ms, 5000 ms a 7500 ms), intenzity laseru (100 a 75 %) a teploty (laboratorní a 4-8 °C). Kalibrační standardy a vzorky byly měřeny ve skleněných vialkách.

Pro identifikaci byla porovnávána celá spektra analyzovaných látek. Pro vyhodnocení linearitu kalibračních závislostí byla použita metoda nejmenších čtverců a kalibrační závislosti byly vyhodnoceny plochou vybraného intenzivního pásu a jeho intenzitou. Linearitu pro všechny podmínky měření splňovala pouze závislost plochy pásu. Pro stanovení analytů byly zvoleny následující podmínky: integrační čas 5000 ms, 100 % intenzita laseru a laboratorní teplota.

U sedmi testovaných lihovin bylo stanoveno množství ethanolu. Obsah methanolu a dalších nejčastějších příměsí stanoven nebyl, žádná z testovaných látek (ethylacetát, isoamylalkohol, isobutanol) nebyla při porovnání se standardy ve spektru nalezena.

Dále byla testována identifikace a stanovení obsahu cukrů (glukóza, fruktóza) v sirupech. U sedmi vybraných vzorků byly identifikovány a stanoveny obě látky. V domácím višňovém likéru byl identifikován a stanoven ethanol a identifikovány oba typy cukrů.