VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ

FACULTY OF CHEMISTRY

ÚSTAV CHEMIE A TECHNOLOGIE OCHRANY ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ

INSTITUTE OF CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF ENVIRONMENTAL PROTECTION

CHARAKTERIZACE ORGANICKÝCH LÁTEK V BIOUHLU A JEJICH UVOLŇOVÁNÍ V PŮDNÍM EKOSYSTÉMU

CHARACTERIZATION OF ORGANIC SUBSTANCES IN BIOCHAR AND THEIR RELEASE IN THE SOIL ECOSYSTEM

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE — Bc. David Bočán

AUTHOR

VEDOUCÍ PRÁCE — Ing. Ludmila Mravcová, Ph.D.

SUPERVISOR

BRNO 2022

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
FAKULTA CHEMICKÁ

Zadání diplomové práce

Číslo práce:	FCH-DIP1674/2021	Akademický rok: 2021/22
Ústav:	Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí	
Student:	**Bc. David Bočán**	
Studijní program:	Chemie a technologie ochrany životního prostředí	
Studijní obor:	Chemie a technologie ochrany životního prostředí	
Vedoucí práce:	**Ing. Ludmila Mravcová, Ph.D.**	

Název diplomové práce:

Charakterizace organických látek v biouhlu a jejich uvolňování v půdním ekosystému

Zadání diplomové práce:

1. Vypracovat literární rešerši na téma výskytu organických látek pocházejících z biouhlu v půdním ekosytému a jejich možného dopadu na tento ekosystém.
2. Optimalizovat různé metody zpracování vzorků biouhlu a půdy ve spojení s koncovou analýzou pomocí GC/MS.
3. Analyzovat vybrané vzorky biouhlů a půdy.
4. Zhodnotit a interpretovat získané výsledky.

Termín odevzdání diplomové práce: 13.5.2022:

Diplomová práce se odevzdává v děkanem stanoveném počtu exemplářů na sekretariát ústavu. Toto zadání je součástí diplomové práce.

Bc. David Bočán student	Ing. Ludmila Mravcová, Ph.D. vedoucí práce	prof. Ing. Jiří Kučerík, Ph.D. vedoucí ústavu

V Brně dne 1.2.2022

prof. Ing. Michal Veselý, CSc.
děkan

Abstrakt

Záměrem této práce byla optimalizace extrakcí 38 PAH a 7 PCB sloučenin na vzorcích komerčně dostupného biouhlu a následně extrakce těchto látek z vybraných reálných vzorků biouhlu a půdy pomocí nejvhodnější stanovené metody. Koncentrace uvedených látek v těchto extraktech byla stanovena s využitím plynové chromatografie s hmotnostní detekcí. Nakonec byla z takto určených koncentrací v jednotlivých vzorcích vyvozena míra uvolňování těchto látek z biouhlu do půdy.

V teoretické části byla provedena literární rešerše shrnující proces výroby biouhlu a jeho vlastnosti. Další část byla věnována organickým látkám, které se v biouhlu mohou vyskytovat a byly zde shrnuty jejich vlastnosti a účinek na životní prostředí a organismy. Dále pak byly zmíněny nejčastěji využívané způsoby extrakcí a stanovení těchto látek. Nakonec byla charakterizována půda, její jednotlivé složky a změny ke kterým v ní dochází po přidání biouhlu.

V praktické části byla provedena optimalizace extrakcí pomocí PSE extraktoru a extrakcí pomocí termální desorpce. Po nalezení optimální kombinace parametrů pro každou extrakční metodu byly tyto metody aplikovány na reálné vzorky biouhlů a půd. Kvalitativní analýza byla provedena pomocí GCxGC-TOF hmotnostního spektrometru a kvantitativní analýza pomocí MRM metody na GC-MS^2 hmotnostním spektrometru.

Klíčová slova

Polycyklické aromatické uhlovodíky, Polychlorované bifenyly, Extrakce, Biouhel, Půda, Termální desorpce, Extrakce podporovaná tlakem, Plynová chromatografie, Hmotnostní spektrometrie

Abstract

The aim of this master's thesis was to optimize the extraction of 38 PAH and 7 PCB compounds from samples of commercially available biochar and then apply the most suitable extraction method to real samples of biochar and soil. The concentrations of mentioned compounds were determined by using gas chromatography with mass spectrometry detection. Finally, from these concentrations in individual samples, a rate of release of these compounds from biochar to soil was determined.

The theoretical part was focused on summarizing the process of biochar production and its properties. The next part deals with compounds that can be present in biochar, their physicochemical properties and effects on organisms and the environment. Also, a most common ways of extracting and determinating these compounds are mentioned. The final part focuses on soil and its characteristics and the changes it undergoes when biochar is applied to it.

In the practical part an extensive optimization of extractions using a PSE extractor and thermal desorption extraction was conducted. After determining optimal conditions for both types of extraction methods, these methods were applied to real samples of biochar and soil. Qualitative analysis was carried out using GCxGC-TOF mass spectrometer and quantitative analysis by MRM method on GC-MS^2 mass spectrometer.

Keywords

Polycyclic aromatic hydrocarbons, Polychlorinated biphenyls, Extractions, Biochar, Soil, Thermal desorption, Pressurized solvent extraction, Gas chromatography, Mass spectrometry

BOČÁN, David. *Charakterizace organických látek v biouhlu a jejich uvolňování v půdním ekosystému*. Brno, 2022. Dostupné také z: https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/139329. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí. Vedoucí práce Ludmila Mravcová.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracoval samostatně a že všechny použité literární zdroje jsem správně a úplně citoval. Diplomová práce je z hlediska obsahu majetkem Fakulty chemické VUT v Brně a může být využita ke komerčním účelům jen se souhlasem vedoucího diplomové práce a děkana FCH VUT.

.....

podpis studenta

Poděkování

Zde bych chtěl poděkovat vedoucí mé diplomové práce Ing. Ludmile Mravcové Ph.D. za cenné odborné rady jak při experimentální části a měření, tak při diskuzích o sepisování této práce. Poděkování patří také Ing. Janu Fučíkovi za jeho ochotu, rady a i občasnou pomoc se vzorky. Za možnost úspěšně sepsat tuto práci vděčím také své rodině a nejbližším, kteří mě podporovali, kdykoliv jsem zažíval těžké chvíle při jejím vypracovávání.

Obsah

1 Úvod ... 6
2 Teoretická část ... 7
2.1 Pyrolýza ... 7
2.1.1 Doba zdržení v reaktoru ... 7
2.1.2 Použitá teplota ... 8
2.1.3 Tlak ... 9
2.2 Biouhel ... 10
2.2.1 Chemické vlastnosti ... 10
2.2.2 Fyzikální vlastnosti ... 13
2.2.3 Využití biouhlu ... 14
2.3 Organické látky v biouhlu ... 16
2.3.1 Polycyklické aromatické uhlovodíky (PAHs) ... 16
2.3.2 Volatilní organické sloučeniny v biouhlu ... 19
2.3.3 Polychlorované bifenyly (PCBs) ... 20
2.3.4 Tvorba organických látek během pyrolýzy ... 21
2.3.5 Extrakce ... 22
2.3.6 Stanovení ... 25
2.3.7 IBI normy využívané pro analýzu organických látek v biouhlu ... 27
2.3.8 EBC normy využívané pro analýzu organických látek v biouhlu ... 27
2.4 Půda ... 30
2.4.1 Složky půdy ... 31
2.4.2 Typy půd ... 32
2.4.3 Úrodnost ... 33
2.4.4 Kationtová kapacita, pH a schopnost zadržovat vodu ... 33
2.4.5 Změny v půdě vyvolané působením biouhlu ... 34
2.4.6 Osud organických kontaminantů v půdě ... 35
3 Cíl práce ... 37
4 Experimentální část ... 38
4.1 Použité chemikálie a materiál ... 38
4.2 Použité standardy ... 38
4.3 Přístroje a pomůcky ... 39
4.4 Vzorky biouhlu ... 39

4.5 Vzorky půd ... 39
4.6 Příprava kalibrační závislosti ... 40
4.7 Optimalizace extrakcí ... 40
4.7.1 Příprava vzorků ... 40
4.7.2 Extrakce s využitím termální desorpce ... 41
4.7.3 PSE extrakce ... 43
4.8 Analýza extraktů pomocí plynové chromatografie s hmotnostní detekcí ... 44
4.8.1 Kvalitativní stanovení všech látek s využitím GC-TOF ... 44
4.8.2 Kvantitativní stanovení vybrané skupiny sloučenin s využitím GC-MS^2 ... 45
5 Výsledky a diskuse ... 46
5.1 Vyhodnocení přichystané kalibrační závislosti a určení LOD a LOQ ... 46
5.2 Optimalizace ... 47
5.2.1 Vyhodnocení optimalizace PSE extrakce ... 47
5.2.2 Vyhodnocení optimalizace termální desorpce ... 51
5.2.3 Opakované nejlepší extrakce PSE a termální desorpce ... 53
5.3 Vyhodnocení kvantifikace extraktů z reálných vzorků ... 55
5.3.1 Porovnání extraktů z původních biouhlů Sonnenerde a Novoterra ... 55
5.3.2 Porovnání biouhlů před a po interakci s půdou ... 56
5.3.3 Stanovení míry kontaminace půdy z biouhlu ... 60
5.3.4 Termální desorpce nejvíce kontaminované půdy a příslušného biouhlu ... 64
5.3.5 Shrnutí a porovnání výsledků kvantitativní analýzy ... 66
5.4 Vyhodnocení kvalitativní analýzy ... 67
5.4.1 Nejlepší extrakt z PSE optimalizace ... 67
5.4.2 Nejlepší extrakt z optimalizace termální desorpce ... 67
5.4.3 PSE extrakty nejkontaminovanější půdy a příslušného biouhlu ... 69
5.4.4 Shrnutí a porovnání výsledků kvalitativní analýzy ... 73
6 Závěr ... 74
7 Citovaná literatura ... 75
8 Seznam obrázků ... 84
9 Seznam tabulek ... 86
10 Seznam použitých zkratek ... 88
11 Přílohy ... 89

1 Úvod

Odpad vždy byl a stále zůstává velkým problémem stále se rozrůstajícího lidstva a jeho vyprodukované množství se stále zvyšuje. Tudíž je nutno vyvíjet a používat technologie na jeho co nejefektivnější zpracování, nebo recyklaci základních surovin v něm a přeměnit tak odpad na zdroj ať už těchto surovin, nebo i energie. Jedním z těchto velmi efektivních procesů je pyrolýza.

Pyrolýzou lze zpracovávat různé typy odpadů od například gastroodpadu, přes bioodpad, až po odpad z čistění odpadních vod (čistírenské kaly), standartně ale především bioodpad. Jedná se o tepelné zpracování těchto odpadů bez přístupu vzduchu, tudíž nedochází k hoření (oxidaci), ale pouze k tepelnému rozkladu. Produkty tohoto procesu jsou pyrolyzní plyn a olej, které se dají přímo spalovat za účelem získání energie nebo se dají využívat například jako suroviny pro syntézu alternativních paliv a izolování různých chemických látek. Dalším produktem je tuhý zbytek, kterým může být právě biouhel, pokud se pyrolyzuje biomasa.

Biouhel jako velmi pórovitá látka bývá využíván jako absorbent v různých odvětvích, například při čistění odpadních vod, ale také při čištění plynů nebo dokonce jako nosič pro některá léčiva. Také se využívá pro zlepšení vlastností půdy, protože díky jeho pórovité struktuře výborně zadržuje vodu a živiny v ní rozpuštěné. Celý tento komplex pak slouží jako výborný habitat pro edafon. Další pozitivní vlastností biouhlu je to, že se z něj uhlík, ze kterého je tvořen uvolňuje velmi pomalu a v malém množství. Tím pádem se tvorba biouhlu a jeho následné přidávání do půdy nabízí jako výborný způsob sekvestrace uhlíku a jeden ze způsobů regulace klimatické změny, jelikož tento amorfní uhlík může zůstávat v biouhlu stabilní po staletí, možná až tisíciletí.

Bohužel tvorba biouhlu nepřináší pouze výše zmiňovaná pozitiva. V procesu pyrolýzy mohou vznikat také látky ne příliš prospívající životnímu prostředí. Jedná se především o polycyklické aromatické uhlovodíky (PAH) a polychlorované bifenyly (PCB). Obě tyto skupiny látek nepříznivě ovlivňují jak zdraví půdy, tak živočichů a potažmo i lidí, jelikož v přírodě dochází jednak k jejich bioakumulaci a také jejich přímé účinky vykazují toxicitu a karcinogenitu. Obsahy těchto látek je nutno v biouhlu sledovat a optimalizací parametrů pyrolýzy regulovat. Pouze pokud biouhly splňují stanovené limity pro tyto látky, tak je lze použít pro úpravu půdních vlastností, nebo pro další, výše zmíněné aplikace.

2 Teoretická část

2.1 Pyrolýza

Je procesem, během kterého dochází k termickému rozkladu a přeměně uhlíkatého materiálu za úplné absence oxidantů, nebo pouze při jejich velmi nízkých koncentracích (např.: kyslík, vodní pára, oxid uhličitý) [1]. Vstupní materiál, kterým může být biomasa, ale i například uhlí a různé odpady, se přeměňuje na pevný zbytek (biouhel při pyrolýze biomasy), pyrolyzní olej a pyrolyzní plyn (lze ho spalovat a využívat pro ohřev reaktoru). Množství jednotlivých reziduí, jejich složení a vlastností silně závisí na použitém vstupním materiálu a parametrech procesu, jako je například teplota a doba zdržení v reaktoru [2].

2.1.1 Doba zdržení v reaktoru

Jedním z parametrů výrazně ovlivňujících složení výsledného produktu je právě doba zdržení v reaktoru. Obecně je známo, že kratší doba zdržení v reaktoru s vyšší teplotou, produkuje vyšší množství pyrolyzního oleje, a naopak delší doba zdržení za stejných teplot produkuje více pyrolyzního plynu. Tuhý zbytek vzniká především při pyrolýze za nižších teplot [2]. Při těchto nižších teplotách se vyprodukuje tím více biouhlu, čím delší je doba zdržení. Díky dlouhé době zdržení se redukuje množství nestabilní organické hmoty a produkuje se tak stabilnější biouhel s vyšší hodnotou fixovaného uhlíku. Na druhou stranu se snižuje jeho porosita a specifický povrch [3].

2.1.1.1 Pomalá pyrolýza, torrefakce

Tento proces je nutno provádět v jednotlivých várkách, protože probíhá za dlouhých dob zdržení (hodiny až desítky hodin, někdy i řádech dní) a nižších rychlostí ohřevu na maximální teplotu 300 – 500 °C. Pyrolyzní olej obvykle nevzniká, nebo pouze v malém množství a pyrolyzní plyn se obvykle spaluje a využívá k ohřevu reaktoru [2]. Jedná se o nejstarší typ pyrolýzy a vzniká při něm majoritní podíl biouhlu, a to v rozmezí 30 –60 % hmotnosti vstupního materiálu [3].

Torrefakce probíhá sice rychleji než pomalá pyrolýza, ale stále se pohybuje v řádu hodin, minut jen v některých případech. Probíhá ještě za nižších teplot než pomalá pyrolýza a to 225 – 530 °C. Primárně je používána pro zvýšení energetické hustoty paliva, odstranění vlhkosti a lehkých volatilních látek. Biomasa se během torrefakce rozkládá jen z části za uvolňování organických volatilních látek [2].

2.1.1.2 Rychlá, blesková pyrolýza

Při rychlé pyrolýze se využívá vysokých rychlostí ohřevu a také vyšších teplot (450 – 600 °C). Lze ho provádět kontinuálně, protože doba zdržení v reaktoru se pohybuje řádově v sekundách. Kvůli tomu je ale nutno mít poměrně homogenní materiál namletý na menší částice [2]. Při tomto typu pyrolýzy vzniká jen menší množství biouhlu a primárně se tento způsob využívá především pro produkci pyrolyzního oleje (vzniká ho až 60 – 75 % z hmotnosti vstupního materiálu). Protože páry unikající ze vstupního materiálu se nezdržují

v reaktoru a následně rychle kondenzují, nedochází k sekundárním reakcím. Podobné je to i u bleskové pyrolýzy, což je vlastně rychlá pyrolýza, u které se doba zdržení ještě více zkrátila, a to na méně než 1 s a rozmezí teplot zvýšilo na 450 – 1000 °C. Tento proces je ovšem limitován například termální stabilitou pyrolyzního oleje a jeho korozivními účinky [4].

2.1.2 Použitá teplota

Maximální dosažená teplota během pyrolýzy také výrazně ovlivňuje jak poměrné množství jednotlivých reziduí, tak i vlastnosti samotného biouhlu. S rostoucí teplotou se například odštěpuje více funkčních skupin z původní biomasy, což výrazně ovlivňuje vlastnosti chemické a také narůstá pórovitost biouhlu což se projevuje ve vlastnostech fyzikálních (viz body 2.2.1 a 2.2.2) [5].

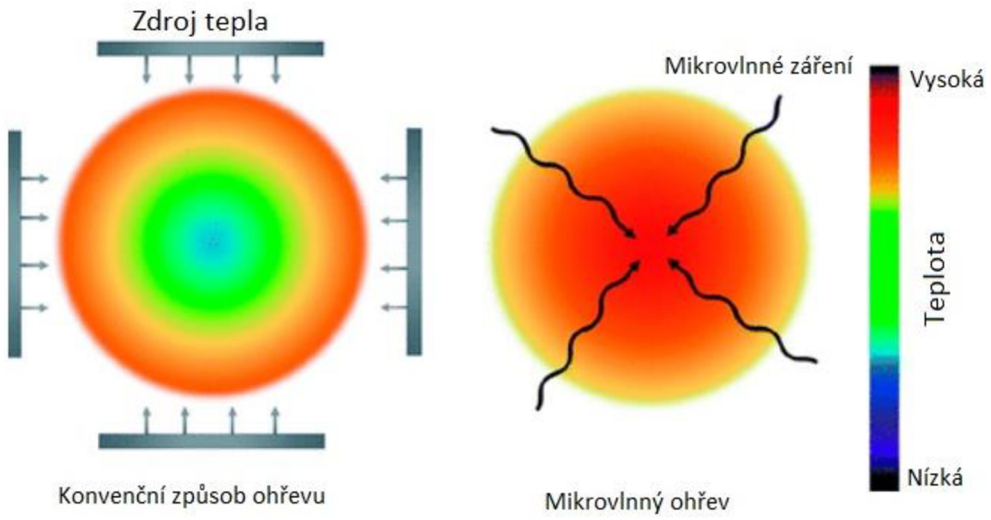
Produkce biouhlu lze rozdělit do tří teplotních intervalů. V prvním (pre-pyrolyzním) intervalu, teplota nepřekračuje 200 °C a dochází k sušení materiálu, odpaření lehkých volatilních látek a částečnému odštěpování karboxylových a hydroxylových funkčních skupin. V dalším teplotním intervalu (pyrolyzním) od 200 °C do 500 °C se velmi rychle odpařují další volatilní látky a rozkládá se hemicelulóza a celulóza. Nakonec při teplotách vyšších než 500 °C dochází k rozkladu ligninu a dalších organických složek se silnými chemickými vazbami. Tyto intervaly ovšem nemusí být stoprocentně konzistentní a jednotlivé procesy z různých intervalů mohou probíhat i současně, v závislosti na rychlosti ohřevu, použitém materiálu a velikosti částic. Obecně ale platí, že se zvyšující se teplotou obsah biouhlu klesá [5]. Za vysokých teplot biouhel podléhá sekundárním reakcím a zvyšuje se tak obsah pyrolyzního plynu a oleje, jelikož je biouhlu dodávána mnohonásobně vyšší energie, než je potřeba na štěpení vazeb a tak dochází ke zplyňování samotného biouhlu. Tento plyn pak může opět kondenzovat za vzniku pyrolyzního oleje nebo zůstávat ve formě pyrolyzního plynu. Teploty, za kterých toto nastává jsou ovšem charakteristické pro každý typ a vlastnosti vstupní biomasy [6].

Dalším parametrem souvisejícím s použitou teplotou je i rychlost ohřevu. Ovlivňuje jak vlastnosti tak složení finálního produktu. S nízkou rychlostí ohřevu dochází k vyšší produkci biouhlu, protože sekundární reakce v biouhlu jsou redukovány a je tak snížena produkce pyrolyzního plynu a oleje a většina biomasy se tak přemění na biouhel. Naopak při vysokých rychlostech ohřevu je podporována fragmentace biomasy a sekundární reakce vedoucí ke snížení produkce biouhlu a zvýšení obsahu plynu a oleje [6].

2.1.2.1 Mikrovlnami podporovaná pyrolýza

Jedná se o typ pyrolýzy, u kterého je značně vylepšen způsob ohřevu. Již nedochází jen k vnějšímu ohřevu, jako u konvenčních způsobů pyrolýzy, ale i k ohřevu vnitřnímu. Ten je způsoben interakcí mikrovlnného elektromagnetického záření s částicemi v zahřívaném materiálu, které mohou být přítomny přirozeně, nebo lze zahřívaný materiál jimi dopovat. Tyto částice jsou schopny absorbovat mikrovlnné záření a následně takto absorbovanou energii vyzařovat ve formě tepla [7]. Konkrétně dochází k dielektrickému ohřevu, kdy

mikrovlnné záření interaguje s polárními molekulami přítomnými v biouhlu (např. voda). U nich v důsledku přítomnosti permanentních nebo indukovaných dipólů dochází k absorpci tohoto záření a následně k rotacím a pohybu těchto molekul, protože se pohlcením tohoto záření navyšuje vibrační, rotační a translační energie jejich elektronů. Pohyb těchto molekul způsobuje mezimolekulární tření a kolize, při čemž se uvolňuje energie ve formě tepla. Obecně platí, že čím je ohřívaný materiál polárnější, tím účinnější je mikrovlnný ohřev. Díky tomuto vnitřnímu ohřevu se zvyšuje rychlost chemických reakcí, snižuje se teplota potřebná pro úplnou karbonizaci a produkuje se biouhel s více jednotnými vlastnostmi. Biouhel je také kvalitnější a je ho produkováno větší množství než při produkci biouhlu za stejných podmínek, ale při použití konvenčního způsobu ohřevu [8]



Obrázek 1: Porovnání konvenčního a mikrovlnného způsobu ohřevu [7]

2.1.3 Tlak

Snížením tlaku, neboli používáním vakuové pyrolýzy dochází k rychlejší devolatilizaci biouhlu a také se tak zabraňuje volatilizaci a ztrátám anorganických složek, což vede k produkci kvalitnějšího biouhlu [5].

Tlak lze v procesu pyrolýzy také zvyšovat, je to ale spojeno s vyššími náklady pro zajištění vyšší odolnosti technologie. Díky zvýšení tlaku se zvyšuje produkce jak biouhlu, tak podíl fixovaného uhlíku v něm [5]. Dochází ke zvýšení doby zdržení v reaktoru a tak i sekundárním reakcím, které rozkládají volatilní sloučeniny uvolněné z biouhlu a vedou ke zvýšení jeho produkce [6].

2.2 Biouhel

Jedná se o vysoce porézní pevnou látku vzniklou z pyrolýzy biomasy. Je znám již několik tisíc let a asi nejznámější je pod pojmem dřevěné uhlí, které vzniká při pyrolýze dřeva [9]. Procesem pyrolýzy se mění struktura a vlastnosti použité biomasy (viz. Obrázek 2) a uhlík ze kterého je tvořena se fixuje tak, že je velmi obtížné jej zpětně uvolnit do atmosféry ve formě CO_2 pomocí běžně probíhajících procesů v přírodě (např. mikrobiální rozklad). Konkrétní vlastnosti biouhlu jsou velmi závislé na použitém vstupním materiálu a podmínkách pyrolýzy a definují tak jeho pozdější použití [10]. Sleduje se například proximální složení (obsah popela, těkavých sloučenin a fixovaného uhlíku a vlhkosti [11]), a další vlastnosti (viz bod 2.2.1 a 2.2.2).

Obrázek 2: Příklady vstupních materiálu a výsledného biouhlu [12]

2.2.1 Chemické vlastnosti

Mezi chemické vlastnosti se řadí proximální a prvkové složení a s ním související atomové poměry v biouhlu, dále jeho energetická hodnota a hodnota pH. Lze také sledovat degradaci a reaktivitu biouhlu a s tím související možnost jeho samovznícení při skladování [9].

2.2.1.1 Obsah fixovaného uhlíku

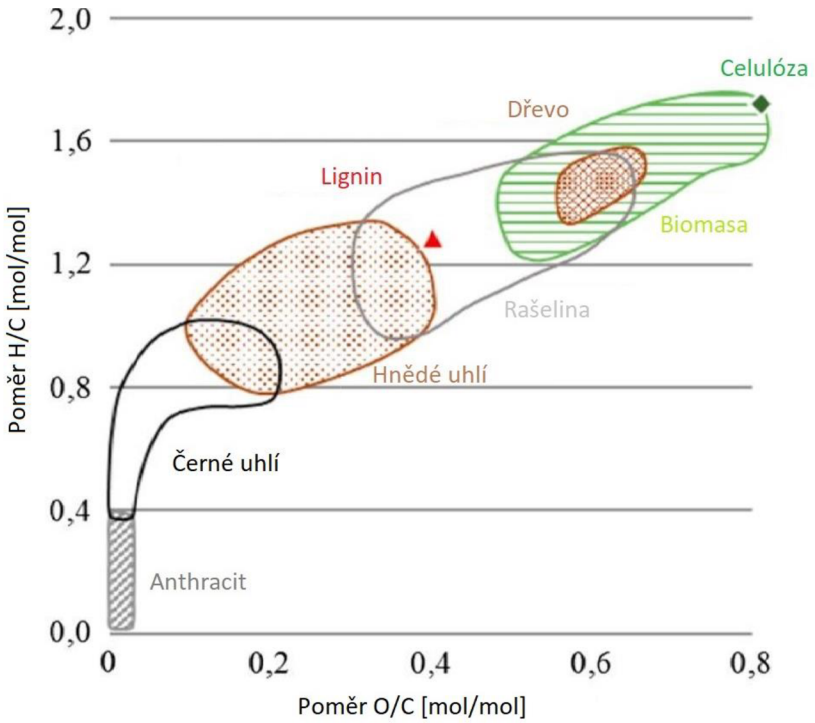
Jedná se o uhlík, který se nachází v biouhlu v pevné fázi po odstranění volatilních složek (za využití zvýšené teploty). Při zvýšení teploty, které je biouhel podroben na 250 – 350 °C se obsah fixovaného uhlíku pohybuje mezi 50 – 60 %. Ovšem pro dosažení 90% obsahu fixovaného uhlíku je nutno teplotu zvýšit až na 700 °C a více. Při tomto zvyšování teploty pak dochází ke ztrátě části méně tepelně stabilního biouhlu tvorbou popela [9].

2.2.1.2 Obsah popela

Na obsahu popela může záviset možné použití biouhlu, například pro průmyslové aplikace biouhlu je nutno, aby byl co nejmenší, jinak by mohl narušovat plynulost určitých procesů, protože vyšší obsah popela v biouhlu znamená jeho nižší teplotu tání. Jedná se o směs anorganických látek obsahujících především alkalické kovy a kovy alkalických zemin, například: CaO, K_2O, Al_2O_3, MgO, ale také SiO_2 [9].

2.2.1.3 *Prvkové složení*

Procesem pyrolýzy dochází k uvolnění funkčních skupin obsahujících především kyslík a vodík, zatímco větší část uhlíku zůstává v pevném zbytku. Tato skutečnost lze vyjádřit pomocí poměrů jednotlivých atomů, konkrétně poměru vodíku ku uhlíku a kyslíku ku uhlíku. Vynesením závislosti prvního poměru na druhém získáme Van Krevelenův diagram (viz. Obrázek 3), který se používá pro znázornění kvality kerogenu, což jsou organické látky v usazeninách, ze kterých se získává palivo (příkladem může být uhlí). Dobře ale také charakterizuje biomasu, která se zpracovává při pyrolýze a také produkovaný biouhel. Experimentálně bylo zjištěno, že s vyšší teplotou použitou při pyrolýze vstupního materiálu se velmi rychle snižuje poměr O/C zatímco poměr H/C se snižuje pouze pozvolna a k jeho výraznějšímu snížení je nutno použít mnohem vyšších teplot. Tudíž trend znázorněný na Obrázek 3 platící pro kerogeny je zachován i v případě biouhlu a platí že, čím nižší atomové poměry, tím kvalitnější biouhel. S vyšší kvalitou biouhlu ovšem přichází vyšší obsah popela, který vzniká díky vyšším teplotám a vede k vyšším ztrátám pevného zbytku ve kterém je uhlík fixován [9].



Obrázek 3: Van Krevelenův diagram [9]

2.2.1.4 *Energetická hodnota*

Díky použití vysokých teplot a s tím spojeným zvyšováním obsahu uhlíku se zvyšuje i energetická hodnota biouhlu a to z 15 – 20 MJ/kg pro vstupní biomasu až na 30 – 35 MJ/kg pro biouhel. Přičemž nejvýraznější změna nastává mezi 250 °C. až 350 °C kdy energetická hodnota biouhlu při nárůstu teploty o 100 °C vzrůstá až o 10 MJ/kg. Při dalším zvyšování teploty je nárůst energetické hodnoty spíše pozvolný a zastavuje se na limitní hodnotě 35 MJ/kg [9].

2.2.1.5 Hodnota pH a kationtová kapacita

Jak již bylo zmíněno výše, při pyrolýze dochází k uvolnění funkčních skupin obsahujících především kyslík a vodík. Jedná se o hydroxylové, karbonylové a karboxylové skupiny a tudíž v důsledku jejich ztrát se pH produkovaného biouhlu zvyšuje. Na zvyšování hodnoty pH má vliv také produkovaný popel, který je také velmi alkalický (viz. bod 2.2.1.2). Existují ovšem výjimky, kde díky způsobu pyrolýzy vzniká kyselý biouhel (např. hydrotermální karbonizace) [9].

S hodnotou pH dále souvisí i kationtová kapacita, která je vyjádřením množství negativně nabitých míst na povrchu biouhlu, které jsou dostupné pro navázání kationtu. Jelikož téměř všechny minerální živiny v půdě jsou rozpuštěny jako kationty a mikroorganismy s rostlinami jsou schopny přijímat je především v této formě, je tato vlastnost biouhlu velmi důležitá pro jeho případné využití v zemědělství a je vlastně vyjádřením jeho možné úrodnosti. Tudíž pro toto využití je poměrně nežádoucí používat biouhel produkovaný za velmi vysokých teplot, jelikož ten již postrádá většinu funkčních skupin a jeho kationtová kapacita bude velmi malá [9].

2.2.1.6 Reaktivita

Existují tři hlavní reakce, kterým může biouhel podléhat, a tak degradovat (viz. (1), (2) a (3)). Reakční rychlost těchto reakcí pak vyjadřuje reaktivitu biouhlu.

$$\mathrm{C} + \mathrm{CO_2} \rightarrow 2\mathrm{CO} \tag{1}$$

$$\mathrm{C} + \mathrm{H_2O} \rightarrow \mathrm{CO} + \mathrm{H_2} \tag{2}$$

$$\mathrm{a} \cdot \mathrm{C} + \mathrm{b} \cdot \mathrm{O_2} \rightarrow \mathrm{c} \cdot \mathrm{CO} + \mathrm{d} \cdot \mathrm{CO_2} \tag{3}$$

Rychlost těchto reakcí výrazně závisí na fyzikálních vlastnostech biouhlu, jako je například porozita a specifický povrch, ale také na podmínkách, za kterých mají probíhat. Mohou probíhat pomocí chemisorpce na aktivních místech biouhlu, tudíž za vyšších teplot tyto reakce probíhají rychleji. S tím souvisí i způsob stanovení reaktivity biouhlu, jenž je ve většině případů termogravimetrický. Měří se úbytek hmotnosti biouhlu po zahřátí na určitou teplotu po určitou dobu. Není to ale velmi přesná metoda protože nezohledňuje sorpční mechanismy. Pro určení reaktivity biouhlu lze použít i specifičtější metody, kterou je měření CRI (c*oke reactivity index*) a CSR (*coke strength after reaction*), kdy se vzorek zahřívá na teplotu 1100 °C po dobu dvou hodin v atmosféře CO_2 a CRI se pak vyjádří jako úbytek hmotnosti [9].

2.2.1.7 Samovznícení

Byť výše zmíněné reakce probíhají především za vyšších teplot, je u biouhlu stále možnost jeho samovznícení během skladovaní. K tomu může docházet především při skladování biouhlu ve velkých hromadách kdy biouhlem vytvořené teplo nemá moc možností, jak se rozptýlit do okolí. Toto teplo se produkuje v důsledku pomalé oxidace vzdušným kyslíkem, která je silně závislá na porozitě daného biouhlu a způsobu skladování, dále je ale také

možnost samozahřívání v důsledku absorpce vody z okolí, která může obsahovat mikroorganismy, a ty pak svou aktivitou také produkují teplo. Dalším katalyzátorem samovznícení jsou alkalické kovy obsaženy v popelu, které mohou reagovat se vzdušnou vlhkostí [9].

2.2.2 Fyzikální vlastnosti

Změny v pyrolýzou zpracovávané biomase se neodehrávají pouze na chemické úrovni, ale také na úrovni fyzikální. Rozkladem vláknité struktury biomasy dochází ke změnám v porozitě a s ní souvisejícím povrchem, objemem pórů, hydrofobicitou a retenční vodní kapacitou [9].

2.2.2.1 Porozita a povrch

Její hodnota se zvyšuje v důsledku unikajících volatilních látek, které se při zvýšené teplotě odpařují a při tomto procesu za sebou nechávají kavity – póry. Lze ovšem také uvažovat porozitu biouhlu jako celku, protože namletý biouhel tvoří „póry“ i mezi jednotlivými částečkami biouhlu. Čím vyšší je porozita, tím nižší je pak hmotnost na objemovou jednotku biouhlu, protože póry z velké části vyplňuje vzduch, případně voda.

S porozitou úzce souvisí povrch biouhlu, ten se s rostoucí porozitou zvyšuje a s ním i jeho pozitivní vlastnosti jako například kationtová výměnná kapacita. Povrch se běžně určuje pomocí BET analýzy, při které se sleduje úbytek naadsorbovaného množství přesně definovaného plynu, kterému je biouhel vystaven. Používá se dusík o teplotě 77 K nebo oxid uhličitý při teplotě 273 K. Tímto měřením ovšem nelze povrch určit zcela přesně, protože použité plyny nemusí zcela zaplňovat veškeré mikropóry, tudíž skutečný povrch vzorku biouhlu bývá ještě vyšší. Lze ovšem dosáhnout měrného povrchu až 800 m^2/g v závislosti na použité teplotě a vstupním materiálu při pyrolýze. Pro toto maximum byla použita teplota 700 °C a při dalším zvyšování teploty už měrný povrch opět klesá, protože začíná docházet k rozkladu pevné struktury biouhlu a jeho pórů [9].

2.2.2.2 Objem pórů a distribuce velikosti pórů

Při určení celkového povrchu biouhlu získáváme pouze informace o celkovém měrném povrchu, ale už ne o objemu a velikosti pórů. Tyto dvě veličiny jsou pro většinu aplikací biouhlu stěžejní. Například pro sorpci těkavých látek s většími molekulami by nestačil biouhel, u kterého převládají mikropóry, protože separovaná látka by měla problém do těchto pórů difundovat, byť by byl k dispozici velmi velký povrch pro sorpci. Stejně jako porozita se objem pórů zvyšuje s rostoucí teplotou pyrolýzy. Stanovení se provádí buď pyknometricky, nebo pomocí rtuťové porozimetrie a lze tak určit jak celkový objem pórů, tak distribuci velikosti pórů [9]. Stanovuje se, kolik procent pórů se řadí mezi mikropóry (o šířce menší než 2 nm), mezopóry (o šířce mezi 2 a 50 nm) a makropóry (šířky větší než 50 nm) [13].

2.2.2.3 Hydrofobicita a kapacita vodní retence

Ztrátou funkčních skupin během pyrolýzy je ovlivněna také schopnost interakce s vodou. Jelikož většina těchto skupin byla polárních, zůstává z větší části už jen nepolární uhlíkový zbytek. Hydrofobicita biouhlu ovšem vykazuje zajímavé trendy v závislosti na použité teplotě při pyrolýze. Biouhel produkovaný při nižších teplotách se ukazuje jako hydrofobní, naopak při vyšších teplotách jako hydrofilní. To je pravděpodobně způsobeno tím, že při nižších teplotách stále nejsou rozloženy některé alifatické sloučeniny v biouhlu, a tak způsobují jeho zvýšenou hydrofobicitu. Ovšem při vyšších teplotách pyrolýzy už k jejich rozkladu dojde a výsledný biouhel je tak jen „méně hydrofobní“. Toto chování je také silně závislé na použitém vstupním materiálu. Se zvyšující se teplotou také roste porozita, jak již bylo zmíněno výše a ta posléze převládne nad hydrofobicitou biouhlu a ten tak může absorbovat více vody, čímž narůstá i právě retenční vodní kapacita [9].

2.2.3 Využití biouhlu

Jako pro stabilní, pórovitou látku s vysokým obsahem uhlíku se pro biouhel otevírá spousta možností využití. Byť jsou jeho vlastnosti silně závislé na parametrech pyrolýzy, jeho vlastnosti nachází využití vždy a zahrnují jak remediaci znečištění vycházející z jeho sorpčních vlastností, tak i například zmírnění klimatické, které vychází z jeho vysokého obsahu stabilního uhlíku [14].

2.2.3.1 Vylepšení půdních vlastností

Biouhel má velký potenciál pro vylepšování půdních vlastností hlavně díky zvyšování kapacity vodní retence, která se přídavkem biouhlu do půdy může zvedat až o 18 %. Společně s vodou zadržuje také organické živiny pro rostliny a mikroorganismy a zabraňuje jejich vymývání. Toto je způsobeno jeho porézní strukturou, ve které se voda s živinami velmi dobře zadržují díky kapilárním silám a adsorpci. Další pozitivní vlastností biouhlu je jeho vyšší pH, díky kterému se pH kyselých půd dá regulovat a přiblížit jej do neutrální oblasti. Bylo zjištěno, že půdy obohacené biouhlem vykazují výrazné zvýšení klíčivosti semen, růstu rostlin a celkové úrodnosti. V případné kombinaci s organickými i anorganickými hnojivy se tento efekt ještě násobí. Krom těchto pozitivních efektů na rostliny má biouhel pozitivní účinky i mikrobiální populaci v půdě, protože u půd obohacených biouhlem byla pozorována jak zvýšená aktivita těchto mikroorganismů, tak i nárůst v jejich populacích. Efekt biouhlu na meso a makrofaunu edafonu byl studován především na aktivitě žížal a výsledkem byly pouze krátkodobé negativní efekty, které byly pravděpodobně způsobeny zvýšením pH. Dlouhodobé pozorování neprokázalo žádné zhoršení aktivity žížal v důsledku aplikace biouhlu [14].

2.2.3.2 Zdroj energie a zmírnění klimatické změny

Produkce biouhlu z odpadů z živočišné, rostlinné výroby a případně i z kalů z ČOV se ukazuje být nejen ekonomicky ale ekologicky příznivá. Biouhel totiž nachází využití v mnoha odlišných odvětvích jako adsorbent a také se při jeho výrobě produkuje energie ve formě biopaliv. Jejich množství ovšem závisí na typu použité pyrolýzy (viz. bod 2.1.1). Ekologicky je výroba biouhlu příznivá díky možnosti sekvestrace uhlíku v půdě, díky jeho

dlouhodobé stabilitě. Ta je ale značně závislá na typu biouhlu a prostředí. Další příznivou vlastností je možnost záchytu emisí pocházejících z jeho výroby a jejich dalším využitím. Ukázalo se také, že biouhel v půdě také redukuje emise skleníkových plynů methanu a oxidu dusného z ní jak abiotickými, tak biotickými procesy [14]. Biouhel může fungovat i jako úložiště energie ve formě superkondezátoru. Byly prováděny studie pří kterých bylo zjištěno, že biouhel má výjimečné elektrochemické vlastnosti, ale zároveň si udržuje svoji stabilitu [15].

2.2.3.3 Odstranění znečištění

Biouhel je díky svým sorpčním schopnostem schopen na sebe vázat jak organické, tak i anorganické polutanty, čímž může snižovat jejich biodostupnost a zabraňovat tak jejich bioakumulaci v rostlinách a živočiších [14].

Z anorganických polutantů se biouhel používá především pro odstraňování kationtů těžkých kovů obsažených v odpadních vodách. Ty se na biouhel sorbují díky jeho vysoké porozitě a jeho aktivním místům ve formě funkčních skupin (hydroxylových, karboxylových a amino skupin). Tyto skupiny podporují adsorpční mechanismy jako například elektrostatické přitahování, vodíkové vazby, iontovou výměnu a povrchovou komplexaci. Při pyrolýze ovšem dochází k jejich ztrátám (viz. bod 2.1.2), tudíž je žádoucí pro tuto aplikaci používat biouhel produkovaný za nižších teplot, nebo biouhel po pyrolýze chemicky upravit. Kationty těžkých kovů odstranitelné pomocí biouhlu zahrnují chróm, arsen, kadmium, olovo a zinek [3].

Pomocí biouhlu lze ovšem z odpadních vod odstraňovat i některé anorganické anionty, jako jsou například dusičnany a fosforečnany. Pokud se neregulují, způsobují v recipientech eutrofizaci a takzvaný „vodní květ“ což je přemnožení vodních mikroorganismů (především sinic). To pak vede k nižším koncentracím rozpuštěného kyslíku, a to může způsobit úhyn ryb. Tyto dva anionty se odstraňují také pomocí adsorpce iniciované elektrostatickým přitahováním, povrchovou komplexací a výměnnou ligandů. Pro tuto aplikaci již je nutno biouhel po pyrolýze chemicky upravit, aby se dosáhlo optimálních hodnot adsoprce [3].

Organické kontaminanty odstraňované z odpadních vod pomocí biouhlu bývají nejčastěji antibiotika, které se do nich dostávají jako lidmi nezmetabolizovaná léčiva, nebo i z živočišné výroby. Pro účinné odstranění antibiotiky je biouhel nutno chemicky upravit, konkrétně například modifikací pomocí $Cu(NO_3)_2$. Takto modifikovaný biouhel byl schopen adsorbovat antibiotikum doxycyklin hydrochlorid dvakrát účinněji než původní, neupravený biouhel [16].

Velmi často odstraňovaným polutantem z odpadních vod, konkrétně odpadních vod z textilního průmyslu, jsou různé barvy. Ty zabarvují vodu a mají škodlivé účinky i při velmi nízkých koncentracích, proto je nutné jejích téměř dokonalé odstranění. Kupříkladu byl proveden experiment s adsorpcí methyl oranže na biouhel modifikovaný oxidem železitým a bylo prokázáno, že je takto modifikovaný biouhel velmi efektivním adsorbentem schopným tuto barvu odstranit z více než 97 % [16].

Další skupinou látek, kterou je možno odstraňovat, či imobilizovat sorpcí na biouhel jsou persistentní organické sloučeniny, konkrétně některé pesticidy, PAH a PCB. Všechny tyto látky mají velmi silnou schopnost se kromě dlouhodobé persistence také bioakumulovat. Pesticidy kromě toho mohou působit toxicky na jiné organismy, než bylo původně zamýšleno, narušovat tak ekologickou rovnováhu a také být přímým ohrožením lidského zdraví, pokud se dostávají do potravy. PAH a PCB jsou sloučeniny které jsou těžko biologicky odbouratelné a také mohou přímo ohrožovat lidské zdraví díky svojí karcinogenitě. Na biouhel se tato skupina látek sorbuje kromě kapilárních sil díky $\pi - \pi$ interakcím (především u PAH) a vodíkovým vazbám (u PCB). Pesticidy jako směs látek obsahujících jak velké nepolární molekuly, tak heteroatomy (například chlóru) se pak sorbuji díky kombinaci těchto dvou jevů [16]. Konkrétně byl na biouhel vytvořený ze slupek od mandlí sorbován pesticid 1,2–dibromo–3–chlorpropan a bylo dosaženo adsorpční kapacity 102 mg/g [17].

2.2.3.4 Katalyzátor

Vlastnosti biouhlu se ukazují být jako velmi přínosné i v oblasti používání katalyzátorů. Asi nejdůležitější je jeho vysoká porozita poskytující obrovský povrch, na kterém mohou probíhat reakce, dále také jeho dobrá mechanická odolnost a možnost definovat si parametry požadovaného biouhlu během pyrolýzy (například velikost pórů). Další pozitivní vlastností biouhlu je možnost jeho modifikace, například produkcí magnetického biouhlu. Ten se vyrábí reakcí biomasy s chloridem železitým ještě před pyrolýzou. Po pyrolýze je možné tento magnetický biouhel ještě nasulfonovat reakcí s koncentrovanou kyselinou sírovou. Takto upravený biouhel je pak možno použít při výrobě biodieselu a ukázalo se, že výtěžky bývají vyšší než při použití konvenčních katalyzátorů. Krom toho konvenční katalyzátory bývají často velmi drahé, zatímco biouhel je produkt ze zpracování bioodpadu, kterého je například jen ze zemědělského sektoru více než dostatek. Kromě produkce biodieselu se biouhel používá například při zpracování syngasu pomocí Sabatierovy reakce (tzv. methanace) kdy za vysoké teploty a tlaku dochází k redukci oxidu uhličitého na methan pomocí vodíku [15].

2.3 Organické látky v biouhlu

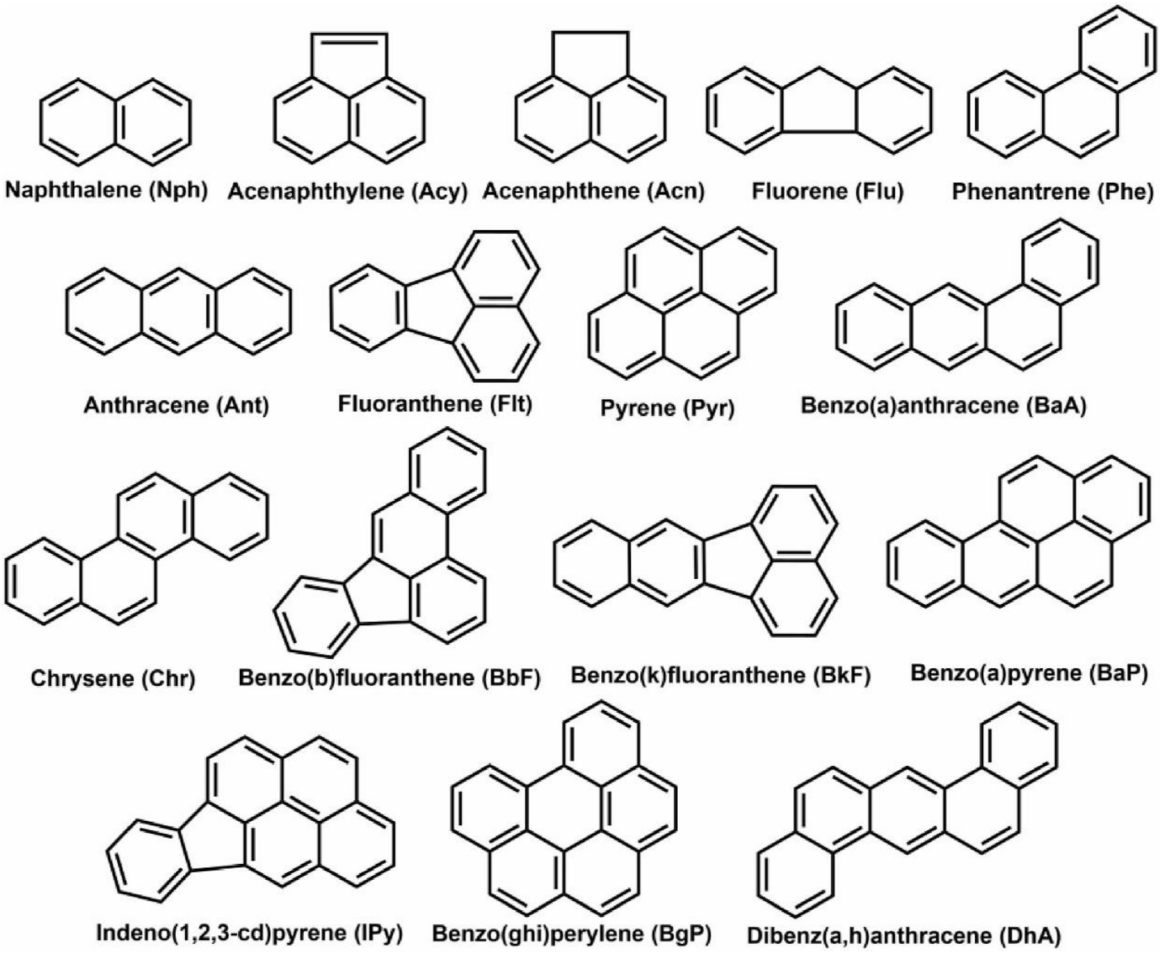
Biouhel ovšem nemusí mít jen pozitivní vlastnosti zmiňované výše. Během pyrolýzy se vlivem vysokých teplot tvoří polyaromatické uhlovodíky (PAH), které biouhel akumuluje. Dále může akumulovat a koncentrovat polychlorované bifenyly (PCB). Obě tyto skupiny látek se pak mohou z biouhlu vymývat například jeho rozkladem, nebo může docházet k jejich přirozené desorpci vlivem prostředí [18].

2.3.1 Polycyklické aromatické uhlovodíky (PAHs)

Jedná se o velmi rozsáhlou skupinu látek tvořenou ze sloučenin, jejichž molekuly obsahují přímo na sebe navázány dvě a více benzenových jader, které mezi sebou sdílejí pár uhlíkových atomů. Tyto látky jsou velmi perzistentními organickými polutanty a do životního prostředí se dostávají především díky nedokonalému spalování biomasy nebo fosilních paliv. Také se ovšem tvoří právě během pyrolýzy při produkci biouhlu, ve kterém zůstávají. Díky jeho zvyšujícímu se využívání a aplikaci například do půdy mohou být poměrně velkým

rizikem. Kromě perzistence mají i karcinogenní, mutagenní a teratogenní účinky, jelikož jejich metabolity reagují s DNA [19].

Lze je podle jejich molekulární hmotnosti rozdělit na LMW PAHs neboli PAHs s nízkou molekulární hmotností (obsahují 2 – 3 benzenové jádra) a na HMW PAHs které obsahují 4 – 7 benzenových jader a jedná se tak o PAHs s vysokou molekulární hmotností. HMW PAHs vykazují mnohonásobně vyšší toxicitu než LMW PAHs [20]. Pro účely stanovování koncentrací v životním prostředí byl před více než 40 lety agenturou EPA sestaven seznam 16 prioritních PAHs zahrnující tzv. parentální PAHs z obou těchto skupin (viz. Obrázek 4). Nyní se ovšem ukazuje, že tento seznam nemusí byt úplně dostačující a nedávné studie předkládají návrhy na jeho modifikaci, tak aby zahrnoval širší skupinu látek (například různě substituované PAHs) a docílilo se tak lepší charakterizace vzorků [21]. Ve studii [22] Kento a kolektiv vyvíjeli metodu pro stanovení dokonce až 72 individuálních sloučenin, včetně halogenovaných PAHs, u kterých se předpokládají ještě silnější toxické účinky oproti jejich nesubstituovaným parentálním molekulám, tudíž je žádoucí tyto látky stanovovat, jelikož mohou výrazně přispívat k celkové toxicitě.



Obrázek 4: Skupina 16 parentálních PAHs podle EPA [21]

2.3.1.1 Chemické a fyzikální vlastnosti

Ve svých čistých formách jsou PAHs většinou bezbarvé nebo bílé, až nažloutlé pevné látky, jelikož mají vysoké body tání a varu. Jedná se o látky velmi nepolární látky se špatnou rozpustností ve vodě a velmi nízkou tenzi par. Tyto dvě vlastnosti se s rostoucí molekulární hmotností ještě více snižují a společně s těmito vlastnostmi naopak vzrůstá odolnost vůči oxidaci i redukci. Jsou také velmi odolné vůči zvýšeným teplotám, ale jsou fotosenzitivní. Mají do jisté míry unikátní UV spektra a lze tak pomocí nich určovat i některé izomery. Kromě absorpce UV záření se PAHs vykazují i následnou emisí absorbovaného záření neboli fluorescencí [23].

2.3.1.2 Zdroje a využití

Zdroje PAHs lze rozdělit na tři hlavní druhy: pyrogenní, petrogenní a biogenní. Do skupiny pyrogenních zdrojů lze zařadit všechny procesy při kterých dochází k termální degradaci organických sloučenin za nedostatečného přísunu kyslíku. K tomu nemusí ovšem docházet jen při pyrolýze ale například i při destruktivní destilaci uhlí nebo pří termálním krakování zbytků po frakční destilaci ropy. Dalším velmi významným zdrojem této skupiny PAHs je nedokonalé spalování paliv v autech, nebo i například při nedokonalém spalování dřeva v krbech nebo při lesních požárech [23].

Petrogenní PAHs vznikají při zrání ropy a dalších procesech zahrnujících ropu. Tyto zdroje jsou poměrně časté, díky rozšířenému transportu, skladování a následnému zpracováváni ropy. Tyto zdroje zahrnují přímé úniky ropy do životního prostředí, a to úniky ropy do vody (například při havárii tankeru), úniky do půdy ze skladovacích nádrží, ale i všechny malé úniky paliv z dopravy (rozlití benzínu nebo nafty, ale i únik olejů z motorů) [23].

Kromě zdrojů souvisejících s lidskou činností zahrnující ropu a spalování se PAHs mohou tvořit i díky biologickým procesům, a to v některých rostlinách a bakteriích při degradaci vegetativní hmoty [23].

Každá tato skupina je charakteristická obsahem konkrétních zástupců PAHs a díky tomu můžeme jednotlivé zdroje rozlišovat. Například při rozlišování pyrogenních a petrogenních PAHs se využívá rozdílu v množství zástupců s pěti benzenovými jádry. Tato skupina jich obsahuje mnohem větší množství, jelikož velmi dlouhý čas potřebný pro tvorbu ropy podporuje také tvorbu těchto molekul. Oproti tomu pyrogenní PAHs se při svém vzniku velmi rychle uspořádávají především do molekul obsahujících šest benzenových jader, které jsou stabilnější. PAHs se využívají pouze jako meziprodukty a nejsou nikdy finálním produktem chemických syntéz v průmyslu. Jako meziprodukty ovšem figurují například při syntéze léčiv, zemědělských produktů (pesticidů), barviv nebo plastů [23].

2.3.1.3 PAHs v životním prostředí a jejich působení na organismy

Díky jejich velmi nízké rozpustnosti ve vodě jsou PAHs primárně nacházeny sorbované na pevné částice, ve vodním prostředí v sedimentech a ve vzduchu na prachové částice, ale většina se jich nachází sorbovaná právě v půdě. V životním prostředí sice podléhají biodegradaci, či fotolýze, ale tyto procesy probíhají poměrně pomalu a spíše převládá bioakumulace PAHs v přírodě napříč potravním řetězcem. V živých organismech obecně, včetně člověka, dochází k metabolizaci PAHs na například epoxidy a dihydrodioly, které mohou reagovat s DNA a mít tak mutagenní a karcinogenní účinek [24]. Některé PAHs mají ovšem také akutní toxické účinky, konkrétně na vodní živočichy a ptáky a většinou se jejich toxicita ještě zvyšuje, pokud jsou vystaveny ultrafialovému záření. Do tkání živočichů se mohou dostávat inhalačně, ingescí, i transdermálně. Do rostlin se PAHs dostávají z půdy skrze kořeny a tento proces je ovlivněn jejich koncentrací, rozpustností ve vodě a typem půdy. Některé rostliny obsahují látky, které je před jejich efekty chrání, a nebo je dokonce využívají jako růstové hormony [23]. Jejich fytotoxicita je největší u LMW PAHs jako je například Naftalen, Fenantren a Antracen které inhibují klíčení semen, ale silně se liší v závislosti na druhu rostliny. Například stejné koncentrace PAHs v půdě které inhibovaly růst kořenů salátu, u kořenů kukuřice nevyvolaly žádné změny. Hlavními faktory obecně ovlivňujícími fytotoxicitu a vstřebávání rostlinami je jejich rozpustnost ve vodě a volatilita. V půdě jsou ovšem silně sorbovány na půdní částice, což jejich toxické účinky limituje (viz. níže bod 2.4.6). Do rostlin ovšem nemusí být nutně vstřebávány a mohou být pouze sorbovány na povrch jejich kořenů, což sice nezpůsobuje fytotoxické účinky, ale tyto rostliny pak mohou být zdrojem přenosu PAHs do vyšších trofických úrovní [25].

2.3.2 Volatilní organické sloučeniny v biouhlu

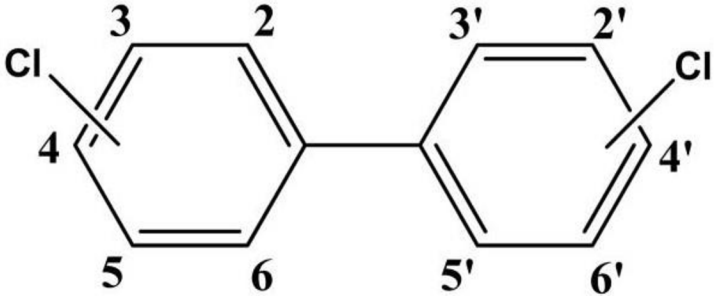
Tato různorodá skupina látek může zahrnovat například organické kyseliny (octovou, mravenčí, propionovou a máselnou), dále některá organická rozpouštědla (methanol, aceton, benzen, fenol, kresol a další fenolické látky). Dalšími VOCs mohou být i benzonitrily a benzofurany, nebo aldehydy a ketony. Všechny tyto látky vzniklé při termální přeměně biomasy (během rekondenzace plynných produktů) mohou v biouhlu zůstávat sorbovány v pórech a následně se uvolňovat po aplikaci do půdy [26]. Toto umělé navýšení koncentrací VOC (především ethylenu) může spouštět různé reakce rostlin, jelikož napodobují rostlinné hormony a mohou tak podporovat i inhibovat (v závislosti na koncentraci a konkrétním přítomném zástupci z VOC) například klíčení semen, růst kořenů, tvorbu obranných mechanismů rostlin před býložravci, vstřebávání živin a celkovou produktivitu rostlin. VOCs ale ovlivňují také půdní mikroorganismy. Například ethylen působí jako inhibitor nitrifikace. Dále mají i baktericidní účinky, které mohou nepříznivě ovlivňovat složení půdních mikroorganismů [27]. VOCs jsou z pohledu fytotoxicity relevantnější než PAHs, kvůli tomu že jejich mobilita je mnohem vyšší, nejsou tak silně sorbovány na půdní organickou hmotu a obecně vykazují poměrně vysoké fytotoxické účinky. Na druhou stranu tyto efekty nejsou dlouhodobého rázu, protože tyto látky nejsou schopny perzistence a v půdě se rozkládají nebo volatilizují a unikají z ní do atmosféry [25].

2.3.3 Polychlorované bifenyly (PCBs)

Jedná se o látky, které se v přírodě přirozeně nevyskytují a byly pouze chemicky syntetizovány pro různé komerční účely. Tato skupina obsahuje 209 individuálních kongenerů dělených podle počtů atomů chlóru v molekule. Kvůli jejich velmi silné schopnosti perzistovat a karcinogenním účinkům pak byla jejich výroba zakázána v USA již v roce 1979 a následně pak byly zařazeny mezi perzistentní organické polutanty (POPs) zakázané v roce 2001 Stockholmskou úmluvou. Díky jejich perzistenci jsou ovšem v životním prostředí přítomny dodnes [28].

2.3.3.1 Chemické a fyzikální vlastnosti

Polychlorované bifenyly jsou jako čisté látky v pevném krystalickém stavu a mají bílou až lehce nažloutlou barvu. Obecně se vyznačují vysokou chemickou stabilitou, až inertností. Mají vysoké body varu, jsou odolné vůči hoření a nevedou elektrický proud. Jsou velmi lipofilní a téměř nerozpustné ve vodě [29]. Obecně se jedná o dvě spojená benzenová jádra, substituovaná různými počty atomů chlóru v různých polohách a podle těchto substitucí se pak rozlišují jednotlivé kongenery (viz. Obrázek 5).

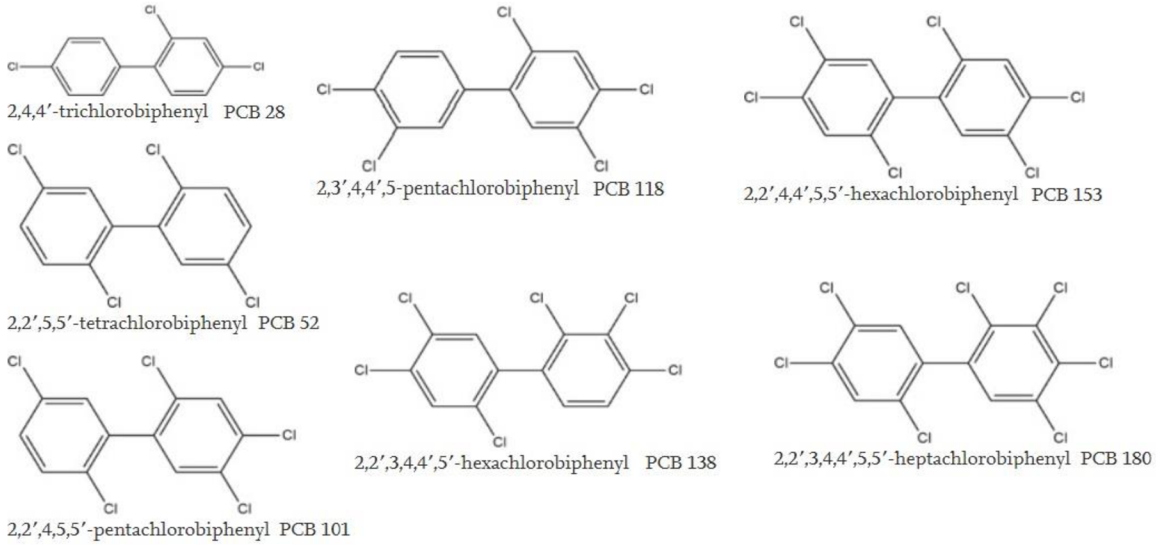


Obrázek 5: Obecný vzorec polychlorovaných bifenylů [30]

2.3.3.2 Zdroje, využití a chování v životním prostředí

Díky své vysoké chemické stabilitě a elektricky izolačním vlastnostem byly dříve využívány jako chladící a hydraulické kapaliny, maziva – a nebo jako dielektrické kapaliny v kondenzátorech a transformátorech. Dále byly využívány jako plastifikátory v barvách, plastech a gumách nebo i v papíru do tiskáren [30]. Historická globální produkce těchto látek byla přibližně 1,3 milionů tun, a i když bylo jejich vyrábění a používání již delší dobu zakázáno, tak se stále do životního prostředí dostávají v menší míře přímými úniky ze starého vybavení nebo ze skládek. V přírodním prostředí jsou pak velmi stabilní, takže dochází spíše k přerozdělování již uniklých látek a jejich migraci napříč potravními řetězci, migrují ale i v důsledku fyzikálních principů, protože podléhají dálkovému transportu atmosférou (tzv. globální destilaci) i do velmi odlehlých oblastí [29]. Schopnost podléhat tomuto dálkovému transportu přímo souvisí s jejich schopností se sorbovat na pevné částice a organickou hmotu, která roste s rostoucím počtem atomů chlóru v molekule. Z atmosféry se pak dostávají zpět do půdy a vodních sedimentů díky mokré depozici, nebo také suchou depozicí, kdy se sorbované na prachové částice usazují na površích. V půdě a sedimentech pak mohou přetrvávat velmi dlouhou dobu a pouze se postupně vymývat nebo se při vyšších

teplotách vypařovat zpět do atmosféry [31] Jejich negativní vliv na životní prostředí a živočichy spočívá nejen v akutních toxických účincích především pro vodní živočichy, ale také v jejich karcinogenitě, koncentrování v tkáních a s postupem do vyšších trofických úrovní v bioakumulaci, přičemž odolnost těchto látek vůči metabolizaci a jejich schopnost perzistovat také roste se zvyšujícím se počtem atomů chlórů v molekule [32]. Pro stanovení míry znečištění polychlorovanými bifenyly v daném prostředí se využívá sedmi tzv. indikátorových zástupců z této skupiny (viz. Obrázek 6), protože právě ty byly ve směsích využívaných v průmyslu nejvíce zastoupeny [33].



Obrázek 6: Sedm indikátorových PCB sloučenin [33]

2.3.4 Tvorba organických látek během pyrolýzy

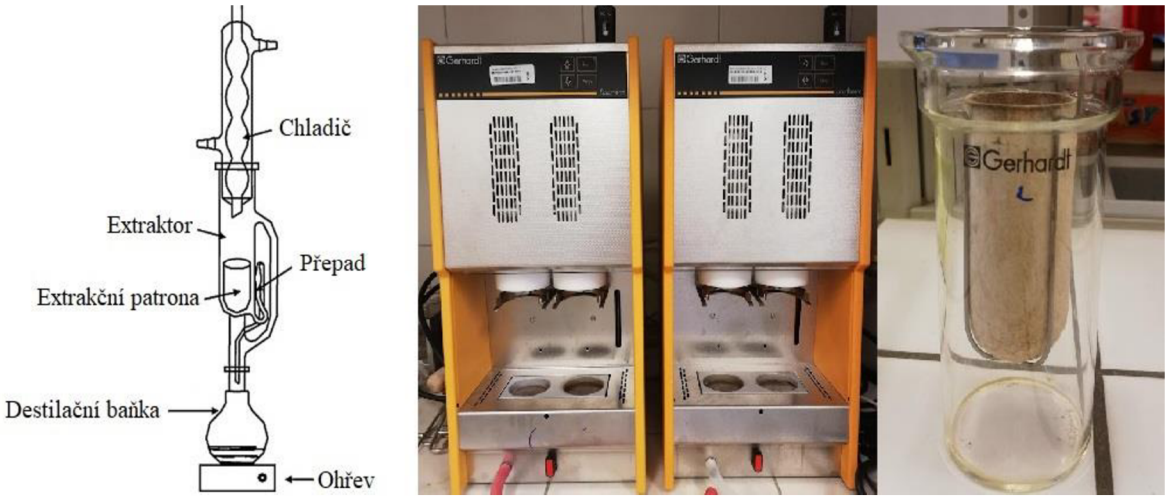
I přes četné pokroky v pyrolyzních technologiích se tvorbě nechtěných produktů nelze úplně vyhnout a je produkce biouhlu stále spojená s tvorbou výše zmíněných kontaminantů jako jsou PAH, PCB a VOC sloučeniny, ale i například dioxiny a furany. Koncentrace těchto látek silně závisí na procesní teplotě a také na použitém vstupním materiálu. Například ve studii provedené Hilberem a kolektivem [34] bylo zjištěno, že se koncentrace PAHs v biouhlech vytvořených při teplotách od 250 do 900 °C pohybovaly od 0,07 do 45 mg/kg. Konkrétně PAHs se během pyrolýzy tvoří již při nižších teplotách (do 500 °C) v důsledku karbonizace a aromatizace původního organického materiálu. Tímto mechanismem vznikají především LMW PAHs jako například Naftalen. Konkrétně dochází k cyklizaci, dehydrogenaci, dealkylaci a odštěpení nativních sloučenin biomasy (CH_4, H_2O, H_2S a CO_2), což nakonec vede k aromatizaci ligninu a celulózy (zůstává pouze aromatická struktura). Kromě LMW PAHs mohou výjimečně vznikat i některé HMW PAHs jako například Benzo(a)pyren a nebo některé fenolické a karbonylové sloučeniny. Při vyšších teplotách (nad 500 °C) již vznikají i HMW PAHs, které jsou tvořeny reakcemi volných radikálů a pyrosyntézou. Radikálem účastnícím se těchto reakcí je především 1,3 – butadienový radikál, který vzniká částečným rozkladem organických sloučenin a nejprve je pyrosynteticky „pospojován“ do stabilnějších LMW PAHs, ale na ty se pak v důsledku vyšších teplot navazují další radikály a tak dochází ke tvorbě HMW PAHs [35].

2.3.5 Extrakce

Extrakce zmiňovaných látek z pevné matrice je téměř vždy spojena s použitím nějakého organického rozpouštědla a předpřípravou materiálu. Ta zahrnuje sušení, mletí, sítování a nakonec extrakci rozpouštědlem výsledné podsítné frakce. Nejčastěji se využívá Soxhletova nebo PSE extrakce a většinou se používají rozpouštědla jako je toluen, dichlormethan, aceton, cyklohexan a případně jejich směsi. Výjimkou jsou VOC sloučeniny, které se většinou tepelně desorbují, nebo se pro jejich stanovení využívá metod mikroextrakcí. U těch je ovšem problém se silnými sorpčními schopnostmi biouhlu, proto je lepší použít například dichlormethan, ve kterém se dobře rozpouští [27].

2.3.5.1 Extrakce dle Soxhleta

Pro tuto extrakci jsou typické větší objemy použitého rozpouštědla (100 – 400 ml) a dlouhý čas potřebný na provedení (6 – 48 h), tyto vlastnosti jsou do jisté míry i nevýhodami. Výhodou je ovšem eliminace vlivu matrice a to, že vzorek poté není potřeba filtrovat [19]. Samotná extrakce je prováděna tak, že navážený vzorek je kvantitativně převeden do extrakční patrony, která je vložena do extraktoru. Po zahájení extrakce páry rozpouštědla vařícího v destilační baňce pod patronou procházejí přes obtokové rameno a následně se kondenzují na chladiči nad patronou. Kapky rozpouštědla pak padají do extrakční patrony. Zde se rozpouštědlo hromadí, až do doby, než hladina dosáhne výšky přepadu, přes který pak zteče zpět do zahřívané destilační baňky a tyto cykly se opakují libovolně dlouho. Existují i automatizované verze této extrakce, kdy dochází ke zkrácení účinných extrakčních časů, zmenšení potřebného objemu rozpouštědla a zjednodušení celého procesu (probíhá pouze v jedné extrakční nádobě a hladinu, vaření a reflux rozpouštědla ovládá přístroj). Jedná se o stále poměrně často využívanou metodu díky dobré reprodukovatelnosti [36]. Ve studii [34] Hilber a kolektiv pomocí tohoto typu extrakce extrahovali 16 U.S. EPA PAHs z biouhlu, přičemž výtěžnost extrakcí byla sledována s využitím vnitřních standardů. Extrahováno bylo toluenem po dobu 36 h a výtěžnosti vnitřních standardů se pohybovaly v rozmezí 42 – 72 %. V další studii využívající extrakci dle Soxhleta s využitím toluenu po dobu 6 h bylo dosaženo rozmezí výtěžností 45 – 79 % [37].



Obrázek 7: Klasická Soxhletova extrakce [38] a automatizovaný extraktor [vlastní foto]

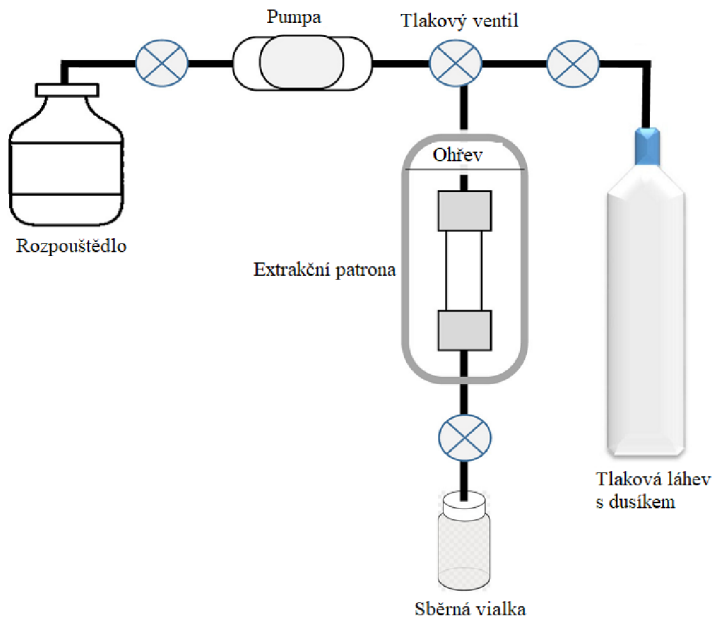
2.3.5.2 *Ultrazvuková extrakce*

Účinnost tohoto typu extrakce je silně závislá na matrici a obsahu kontaminantů ve vzorku. Vždy je nutno vzorek po extrakci zcentrifugovat nebo zfiltrovat [19]. Využívá se zde zvukových vln o frekvenci vyšší něž 16 kHz, což je limit slyšitelnosti pro lidské ucho. Horní limit frekvencí pro šíření v kapalinách a pevných látkách je 500 MHz. Základním mechanismem této extrakce je tvorba vibrací v daném médiu s využitím převodníků elektrické energie na mechanickou o vysoké frekvencí (>20 kHz). Působení takto vytvořeného ultrazvuku vyvolává v kapalinách akustickou kavitaci, což je vlastně tvorba mikrobublinek a jejich následný zánik kavitací. Tato kavitace může být symetrická, což pak ve vzorku vyvolává rázové vlny, které podporují přenos energie do něj, čímž dochází k narušení interakcí mezi matricí a analytem a jeho následné uvolnění do rozpouštědla. Dále pak mohou kavitace být asymetrické, které tvoří mikroproudění schopné rozrušovat matrici vzorku a přispět tak k uvolnění analytu do rozpouštědla [39]. Energie ultrazvuku se také může v extrakčním systému rozptylovat a nebo být přímo pohlcována vzorkem a tak se přeměňovat třením částic na teplo, díky kterému pak dochází ke zvýšení difúzních koeficientů a rozpustnosti analytů [40]. Samotná extrakce je prováděna buď přímým ponořením převodníku elektrické energie na ultrazvuk (tzv. ultrazvukové sondy) do směsi vzorku a rozpouštědla nebo ponořením nádoby s touto směsí do ultrazvukové vany. U této extrakce je nutno kontrolovat míru osvětlení vzorků, aby nedocházelo k fotolýze PAHs a krom toho je také důležitá amplituda produkovaného ultrazvuku, protože při jeho přehnaně velké energii by docházelo k nadměrné tvorbě nového povrchu díky štěpení matrice, na který by se PAHs potom zpětně sorbovaly a nezůstávaly rozpuštěny v extrakčním rozpouštědle [36]. Některé studie [41], [42] sice zjistily podobnou nebo i vyšší účinnost této extrakce v porovnání se Soxhletovou extrakcí, ale jak již bylo zmíněno výše, tato extrakce je silně ovlivněna matricí a stejné účinnosti již v dalších studiích dosaženo nebylo [43], [44]

2.3.5.3 *Extrakce podporovaná tlakem (PSE)*

Oproti Soxhletově extrakci se zde pracuje s kratšími extrakčními časy a menšími objemy rozpouštědel. Díky tomu je taky tato extrakce vhodná pro zpracovávání většího množství vzorků a jako nejvhodnější typ extrakce ze vzorků půd a sedimentů [19]. Principem této metody je zahřátí rozpouštědla nad jeho bod varu, ale zároveň zvýšení tlaku, což ho udrží v kapalné formě. Díky tomu dochází k lepšímu průniku rozpouštědla do vzorku a ke zvýšení difúzních koeficientů a rozpustnosti extrahovaných látek. V důsledku vysokých teplot dochází také k narušení interakcí mezi analytem a matricí (například Van der Waalsových sil, vodíkových můstků a dipólových interakcí) a tak ke snazšímu přechodu analytu do rozpouštědla. Další výhodou je také možnost přečišťování vzorku přímo během extrakce. To se uskutečňuje přidáním sorbentu na dno extrakční patrony (například aluminy nebo florisilu) přes který se extrakt při vypouštění z patrony rovnou přečišťuje. Nevýhodou může být zvýšená teplota během extrakce, pokud je cílem extrahovat termolabilní látky. Samotná extrakce probíhá tak, že po vložení extrakční patrony naplněné vzorkem do systému se do ní začne automaticky pumpovat rozpouštědlo, které se pak zahřívá a tlakuje. Po dosažení nastavených parametrů tlaku a teploty následuje statická fáze, během které analyty přechází z matrice do rozpouštědla. Po skončení této fáze je rozpouštědlo s extraktem vypuštěno do

sběrné vialky za pomocí proudu dusíku (viz. Obrázek 8). PSE extrakce se využívají jak na extrakce z abiotických enviromentálních matric, tak i na extrakce z potravin a biotických vzorků. Lze extrahovat nepolární perzistentní organické polutanty (například PAH, PCB, chlorované uhlovodíky anebo polybromované difenyl éthery), ale také polární polutanty jakými jsou například léčiva a některé pesticidy [45]. Příkladem univerzálnosti této extrakční metody může být článek Mariny G. a kolektivu [46] ve kterém extrahovali až 98 kontaminantů z pobřežních sedimentů. Tyto kontaminanty zahrnovaly těkavé MUSK sloučeniny, UV filtry, repelenty, endokrinní disruptory, PAH a PCB sloučeniny, organofosforové retardéry hoření a několik typů pesticidů. Ve svém článku využili extrakci dichlormethanem při 100 °C, tlaku 103,5 bar a třemi extrakčními cykly po 5 minutách. Extrakty také přečišťovali přímo během extrakce s využitím aluminy jako sorbentu a mědi pro odstranění sirnatých sloučenin. Výsledné extrakty analyzovali na plynovém chromatografu ve spojení s tandemovou hmotnostní spektrometrií a bylo zjištěno, že při optimálních podmínkách tato extrakce vykazuje výtěžnosti 70 – 100 %, linearitu vyšší než 0,99 a limity detekce pod 1 ng/g pro všechny jimi stanovované sloučeniny. V další studii bylo provedeno porovnání PSE extrakce s konvenční Soxhletovou extrakcí pro extrakci PAH sloučenin, PCB kongenerů a chlorovaných pesticidů s využitím certifikovaných materiálů a bylo zjištěno, že tato technika je s tou Soxhletovou srovnatelná a pro rozpouštědlo jako například dichlormethan je i vhodnější [47].



Obrázek 8: Schéma PSE extraktoru [45]

2.3.5.4 Termální desorpce

Tato extrakční technika využívá inertního proudícího plynu k extrakci volatilních a semivolatilních analytů z malého množství zahřívaného pevného, nebo i kapalného vzorku. Tato technika má výhodu v úplné separaci analytů od matrice, které je pak možno v proudu nosného plynu rovnou analyzovat na plynovém chromatografu. Toho lze ovšem využít pouze

pokud interakce mezi matricí a analytem nejsou až příliš silné. Další nevýhodou může být termolabilita některých analytů a některé matrice jsou bohužel také volatilní, takže pak dochází k výrazným interferencím. Dalším problémem této extrakce může být neschopnost dosažení požadovaných LOD, proto je pak nutné zakoncentrování desorbovaných analytů v rozpouštědle a následné přečištění tohoto extraktu. Výhodou ovšem stále zůstává selektivita této extrakce, protože se díky ní extrahují jen látky volatilní a tudíž se pak do plynového chromatografu nedostávají látky, které volatilní nejsou a jen by snižovaly životnost lineru a posléze i celého systému [48]. Samotným mechanismem této extrakce je zahřívání analytů na vhodnou teplotu, při které dochází k jejich volatilizaci a desorpci z matrice. Během tohoto procesu je nutno v systému udržovat inertní atmosféru, protože v důsledku zvýšené teploty by snadno docházelo k oxidaci analytů [49]. Ve studii [50] bylo zjištěno, že pro efektivní desorpci PAHs z půdy má rozhodující vliv teplota použitá při desoprci a jako nejúčinnější se ukázala být teplota 650 °C kdy se při 30 min trvající desorpci dosáhlo více než 80% účinnosti a při 60 min trvající desorpci se tato účinnost zvedla na více než 90 %. Pro desorpci PCB sloučenin z půdy se ve studii [51] dosáhlo účinnosti desorpce 98 % u experimentu trvajícího hodinu při 600 °C. V obou studiích bylo využito elektrické trubkové pece a dusíku jako nosného plynu.

2.3.6 Stanovení

PAHs jsou v životním prostředí téměř všudypřítomné, a to zejména v půdě a sedimentech, ve kterých jsou monitorovány již od 60. let 20. století. Díky tomu jejich analýza prošla značným vývojem a nejčastěji se pro ni využívá plynové chromatografie s hmotnostní detekcí, ale v některých případech i kapalinové chromatografie, kde je kromě hmotnostní detekce možno použít také fluorescenční detektor. Tyto metody jsou dnes již běžně normovány a standardizovány (viz. body 2.3.7 a 2.3.8), ale stále jsou dále vyvíjeny a vylepšovány.

Plynová chromatografie je pro analýzu PAHs preferována díky vyšší selektivitě, rozlišení a citlivosti pro tuto skupinu látek v porovnání s kapalinovou chromatografií. Například v extraktech z uhlí, dehtu a nebo ropy se s použitím plynové chromatografie běžně rozlišují stovky analytů, zatímco kapalinová chromatografie jich v praxi u těchto vzorků zvládne rozlišit několik desítek. Další výhodou plynové chromatografie je možnost využívat vylepšených metod „nástřiku“ vzorku jakými je například přímé propojení desorpční jednotky s plynovým chromatografem, které eliminuje extrakční krok (viz. výše) [52]. Pro analýzu vodných výluhů je možné využívat extrakci míchadlem potaženým vhodným sorbentem (např. polydimethylsiloxanem) také ve spojení s termální desorpcí [53]. Další vylepšenou metodou pro přenos vzorku do plynového chromatografu je velkoobjemový nástřik (místo 1 – 2 µl až stovky µl) za účelem zvýšení limitů detekce a eliminace nutnosti zakoncentrovávání vzorku, díky selektivnímu odpaření rozpouštědla v injektoru. Tím se mohou eliminovat i ztráty těkavějších analytů, ke kterým dochází při zakoncentrovávání na odparce nebo pod proudem dusíku [54].

Pro následnou separaci analytů se u plynové chromatografie téměř výhradně využívá kapilárních kolon ve kterých je stacionární fází tenký film na vnitřní stěně kapiláry a mobilní fází pak nosný inertní plyn proudící skrze tuto kapiláru. Rozměry těchto kolon běžně používaných při analýze vzorků z životního prostředí jsou na délku 15 – 60 m s vnitřním průměrem kapilár 0,18 – 0,32 mm. Jako stacionární fáze se využívají fenyl – methylpolysiloxany, nebo speciální stacionární fáze přímo na separaci PAHs, kde je obsah těchto substituentů optimalizován [52].

Detekce se pak nejčastěji provádí s využitím elektronové ionizace ve spojení s kvadrupólovými analyzátory v režimu SIM nebo MRM, pro co nejnižší limity detekce a kvantifikace [52]. Příkladem využití tohoto typu detekce může být studie od Puspa. L. a kolektivu [55] ve které byly extrahovány vzorky oleje a tímto olejem kontaminované vody a sedimentů. Jednotlivé analyty v těchto extraktech pak byly separovány pomocí plynového chromatografu se speciální kolonou na PAHs Rxi–PAH (60 m x 0,25mm x 0,1 µm). A následně analyzovány tandemovou hmotnostní spektrometrií v režimu SIM a MRM, kde byly stanoveny PAHs a jejich alkylované homology. Bylo zde dosaženo limitů detekce v rozmezí 0,02 – 0,65 ng/ml pro stanovení v režimu SIM a 0,03 – 0,51 ng/ml v režimu MRM.

PCB sloučeniny lze stanovovat podobnými způsoby jako PAHs. Konvenčními metodami pro jejich stanovení jsou kapalinová chromatografie ve spojení s UV detektorem a plynová chromatografie s ECD detektorem, tyto detektory jsou ale v poslední době již téměř všude nahrazeny hmotnostními. A jelikož se PCB sloučeniny většinou v životním prostředí nevyskytují v příliš vysokých koncentracích, je u plynové chromatografie výhodou možnost velkoobjemového nástřiku zmíněná výše [31]. Kapilární kolony typicky používané při separaci indikátorových PCB kongenerů bývají rozměrově i stacionární fází stejné jako při separaci PAHs, například BPX – 50 (50 % fenyl – 50 % methyl polysiloxan). I když tyto kolony nejsou schopny od sebe odseparovat všechny kongenery,tak zvládají separovat téměř všechny indikátorové kongenery od ostatních s výjimkou známých koelucí PCB 28 a 34 a PCB 138 a 164 [56]. Příkladem simultánního stanovení PAH a PCB sloučenin na plynovém chromatografu s nepolární kolonou spojeném s hmotnostním detektorem může být studie [57], ve které byla sledována koncentrace 16 EPA PAHs a 7 indikátorových PCB v mořské vodě u severního pobřeží Španělska. Pro separaci těchto analytů byla využita nepolární kolona TR5MS (30 m x 0,25mm x0,25 µm, se stacionární fází z 5% fenyl polysilfenylen – siloxanu) a pro hmotnostní analýzu iontová past. Limity detekce pro PAHs se v této studii pohybovaly v rozmezí 0,1 – 0,29 ng/l a pro PCB 0,06 – 0,13 ng/l.

Alternativní a také velmi často využívanou metodou detekce obou těchto skupin látek je TOF hmotnostní analyzátor, který poskytuje pro každý analyt celé hmotnostní spektrum, operuje totiž pouze ve SCAN módu, ale díky své konstrukci je schopen také vysokého rozlišení hmot a nízkých limitů detekce a velmi často bývá spojen s dvoudimenzionální plynovou chromatografií [52]. Tato metoda je schopna stanovit obrovské množství látek, jak je demonstrováno ve studii [58] kde byly sledovány semivolatilní organické látky depozitované na povrch listů rostlin břečťanu a bylo detekováno celkem 911 individuálních látek včetně PAHs.

2.3.7 IBI normy využívané pro analýzu organických látek v biouhlu

IBI neboli ve zkratce „International biochar initiative“ využívá pro analýzu PAH sloučenin v biouhlu certifikovaných metod od agentury EPA [59]. Konkrétně se jedná o US EPA 3540 (Soxhletovu extrakci s využitím 100% toluenu jako rozpouštědla [60]) a následné stanovení normou US EPA 8270 na plynovém chromatografu s hmotnostní detekcí [61]. Stanovuje se 16 EPA PAHs a jejich jsou limity stanoveny v rozmezí 6 mg/kg – 300 mg/kg suché váhy, podle aplikace biouhlu [59].

Pro extrakci PCB sloučenin se využívá stejná norma jako při extrakci PAH sloučenin a pro jejich následnou analýzu se využívá norma US EPA 8082 (možnost využití více typů extrakcí a stanovení na plynovém chromatografu s možností více typů detekcí [62]). Nebo také norma US EPA 8275, kdy jsou z naváženého vzorku analyty přímo tepelně desorbovány do plynového chromatografu s hmotnostní detekcí [63]. Limity pro PCB sloučeniny jsou stanoveny v rozmezí 0,2 – 1 mg/kg suché váhy podle použití biouhlu [59].

Stanovení těkavých látek je podle IBI norem pouze volitelné a pokud se provádí, tak se využívá metody ASTM D1762–84 což je standardní metoda chemické analýzy dřevěného uhlí [59].

2.3.8 EBC normy využívané pro analýzu organických látek v biouhlu

„European biochar certificate“ pro analýzu biouhlu využívá normy DIN. Pro extrakci a stanovení PAHs se podle EBC využívá norma DIN EN 16181: 2019-08 která je analogem k normě DIN EN 15527: 2008-9. Podle této normy se naváží 2,5 g předsušeného a rozdrceného vzorku do extrakční patrony. Tento vzorek je pak extrahován 50 ml toluenu s využitím refluxní extrakce. Výsledný extrakt je zakoncentrován do 10 ml a alikvótní část je přepipetována do vialky pro stanovení na GC-MS (přesné parametry jsou uvedeny v tabulce níže).

Tabulka 1: Podmínky pro stanovení PAHs na GC-MS normou DIN 16181: 2019-08 [64]

Plynový chromatograf	Network GC system 7890N, nebo 5975C MSD, nebo inertXL AS 7693 Fa: Agilent Technologies
Kapilární kolona	HP 5MS (30 x 0,25 mm x 0,25 um)
Tepelný program	konstantní teplota 90 °C po dobu 0,5 min gradient 20 °C /min na 250 °C gradient 5 °C /min do 275 °C gradient 20 °C /min do 320 °C konstantní teplota po dobu 5 min
Teplota v transferline	280 °C
Teplota v MS detektoru	150 °C
Objem nástřiku	1 µl
Teplota v injektoru	250 °C
Nosný plyn	Helium o průtoku 1,5 ml/min

Pro extrakci a stanovení PCB sloučenin EBC určuje použití normy DIN EN 16167 a DIN EN 16215. Zde je materiál pomlet na prášek o částicích menších než 1 mm a vysušen při teplotě maximálně 35 °C nebo jej lze vysušit alternativně například chemicky, nebo lyofilizací. Po vysušení je 5 až 10 g vzorku extrahováno Soxhletovou extrakcí s toluenem po dobu 6 h s přídavkem vhodných vnitřních standardů. Alternativně lze také použít PSE extrakci. Výsledný extrakt je pak zakoncentrován a přečištěn podle normy VDLUFA VII 3.3.2.2 s využitím gelové permeační chromatografie. Kvantifikace je pak provedena pomocí GC-MS nebo GC-ECD.

Stanovení obsahu těkavých látek je podle EBC povinné a provádí se v souladu s normou DIN 51720 kdy se naváží 1 g předsušeného a namletého vzorku do žíhacího kelímku s víčkem. Tento kelímek je pak umístěn do pece předehřáté na 900 ± 5 °C po dobu 7 min (± 5 s). Po uplynutí této doby a zchladnutí na pokojovou teplotu je znovu zvážen a úbytek hmotnosti pak vyjadřuje celkové množství těkavých sloučenin [64].

EBC rozděluje biouhly do pěti tříd podle obsahu kontaminantů a tyto třídy pak také určují možné použití daného biouhlu. Tyto limity se ovšem neřídí logikou „čím míně, tím lépe“, ale jsou specificky stanoveny tak aby vyhovovaly každému využití biouhlu v dané třídě a jejich přesné hodnoty a charakteristiky jednotlivých biouhlu každé třídy jsou uvedeny níže (viz. Tabulka 2).

První třídou kvality je „EBC – Feed“ a biouhly, které splňují limity této třídy lze použít jako přídavky do krmiv, protože splňují veškeré regulační požadavky Evropské unie, které se týkají krmiv. Tyto biouhly nelze použít pro přidávání do půd, pokud nesplňují limity pro následující certifikace.

Dalšími třídami kvality jsou „EBC – AgroOrganic“ a „EBC – Agro“, které splňují všechny regulační požadavky Evropské unie na hnojiva zemědělských půd. Jediný rozdíl mezi nimi je ten, že biouhly s certifikací „EBC – AgroOrganic“ splňují navíc i Evropské regulace týkající se organické produkce.

Biouhly splňující limity pro certifikát třídy kvality „EBC – Urban“ je možné používat při sázení stromů a údržbě parků, při sázení okrasných rostlin podél chodníků a nebo i při čištění dešťové vody. Pro tyto biouhly není nutno regulovat například obsah všech 16 EPA PAHs, protože ty jsou v městském prostředí všudypřítomné (například díky výfukům aut) a koncentrují se právě v půdě do které se posléze biouhel přidává. Limity jsou stanoveny pouze pro 8 EFSA PAHs, určených podle směrnic Evropského úřadu pro bezpečnost potravin. Tato skupina zahrnuje Benzo[a]pyren, Benz[a]antracen, Benzo[b]fluoranthen, Benzo[k]fluoranthen, Benzo[ghi]perylen, Chrysen, Dibenz[a,h]antracen a Indeno[1,2,3 – cd]pyren [65]. A byť je tato skupina PAHs určena pro monitorování těchto látek v potravinách, neumožňuje to použití tohoto biouhlu pro přidávání do jakékoliv půdy, ve které by se pěstovaly potraviny.

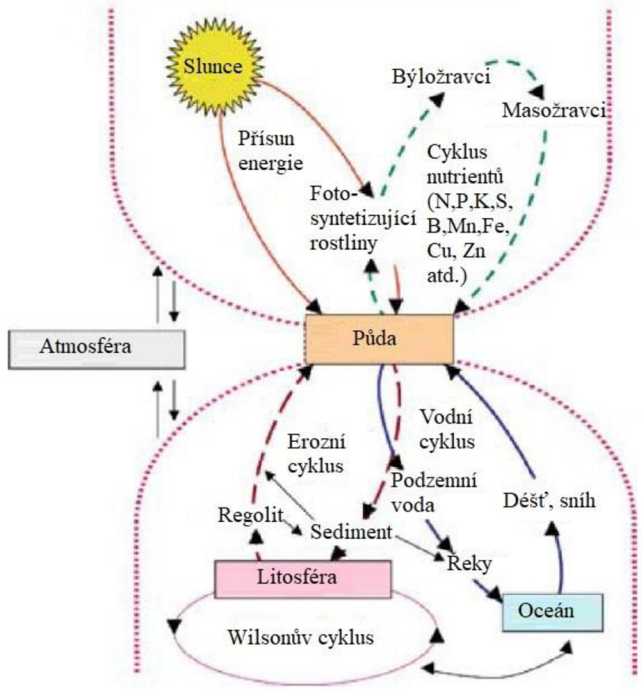
Posledními dvěma třídami kvality jsou „EBC – ConsumerMaterials“ a „EBC – BasicMaterials“ zahrnující všechny aplikace biouhlu, které se netýkají půdy. První zmíněná certifikace zahrnuje použití biouhlu v produktech, které přicházejí do přímého kontaktu s lidskou pokožkou nebo v produktech vyžívaných v potravinářském průmyslu (například plastové počítačové skříně, koberce, květináče, nebo i zubní kartáčky, kelímky na kávu a vodovodní trubky). V těchto produktech ale biouhel musí být použit tak, aby se z produktu neuvolňoval žádný uhelný prach. Biouhel s certifikátem „EBC – basic materials“ lze využívat pro výrobu stavebního materiálu, silničního asfaltu, elektroniky a nebo kompozitních materiálů pro různé využití, ale manipulovat s ním je možno pouze v rámci společností, kde lze zajistit patřičnou ochranu před kontaktem s kůží a dýchacími cestami. Obě tyto třídy kvality nelze použít v jakékoliv aplikaci spojené s půdou a to ani při záměrech remediace kontaminovaného prostředí [66].

Tabulka 2: Limity kontaminantů a charakteristiky tříd biouhlu podle EBC [66]

<table>
<tr><td colspan="2">Třída certifikace</td><td>EBC-Feed</td><td>EBC-AgroOrganic</td><td>EBC-Agro</td><td>EBC-Urban</td><td>EBC-Consumer materials</td><td>EBC-Basic materials</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Prvková analýza</td><td colspan="7">Jen stanovení celkového obsahu uhlíku, vodíku, dusíku, síry a popela</td></tr>
<tr><td>Poměr $H/C_{org.}$</td><td colspan="6"><0,7</td></tr>
<tr><td>Fyzikální parametry</td><td colspan="7">Bez limitů, jen stanovení vlhkosti a sušiny při velikosti částic <3 mm. Dále stanovení objemové hmotnosti, schopnosti zadržovat vodu, pH, obsahu solí a elektrické vodivosti pevného biouhlu</td></tr>
<tr><td>TGA</td><td colspan="7">Bez limitu, pouze stanovení obsahu těkavých látek z první várky nově spuštěného pyrolyzéru</td></tr>
<tr><td>Živiny</td><td colspan="7">Bez limitu, pouze stanovení dusíku, fosforu, draslíku, hořčíku, vápníku a železa</td></tr>
<tr><td rowspan="8">Těžké kovy</td><td>Pb</td><td>10 µg/g</td><td>45 µg/g</td><td>120 µg/g</td><td>120 µg/g</td><td>120 µg/g</td><td rowspan="8">Bez určených limitů, jen stanovení</td></tr>
<tr><td>Cd</td><td>0,8 µg/g</td><td>0,7 µg/g</td><td>1,5 µg/g</td><td>1,5 µg/g</td><td>1,5 µg/g</td></tr>
<tr><td>Cu</td><td>70 µg/g</td><td>70 µg/g</td><td>100 µg/g</td><td>100µg/g</td><td>100 µg/g</td></tr>
<tr><td>Ni</td><td>25 µg/g</td><td>25 µg/g</td><td>50 µg/g</td><td>50 µg/g</td><td>50 µg/g</td></tr>
<tr><td>Hg</td><td>0,1 µg/g</td><td>0,4 µg/g</td><td>1 µg/g</td><td>1 µg/g</td><td>1 µg/g</td></tr>
<tr><td>Zn</td><td>200 µg/g</td><td>200 µg/g</td><td>400 µg/g</td><td>400 µg/g</td><td>400 µg/g</td></tr>
<tr><td>Cr</td><td>70 µg/g</td><td>70 µg/g</td><td>90 µg/g</td><td>90 µg/g</td><td>90 µg/g</td></tr>
<tr><td>As</td><td>2 µg/g</td><td>13 µg/g</td><td>13 µg/g</td><td>13 µg/g</td><td>13 µg/g</td></tr>
<tr><td rowspan="5">Organické kontaminanty</td><td>16 EPA PAH</td><td>Jen stanovení</td><td>4±2 µg/g</td><td>6.0±2,2 µg/g</td><td>Jen stanovení</td><td>Jen stanovení</td><td>Nepožadováno</td></tr>
<tr><td>8 EFSA PAH</td><td colspan="5">1,0 µg/g</td><td>4 µg/g</td></tr>
<tr><td>Benzo[e]pyren</td><td colspan="6" rowspan="2"><1,0 µg/g</td></tr>
<tr><td>Benzo[j]fluoranten</td></tr>
<tr><td>PCB</td><td>Suma 6 indikátorových PCB <10 ng/g</td><td colspan="5">Stanovení sumy 6 indikátorových PCB jen při první várce z nově spuštěné pyrolyzní jednotky <200 ng/g</td></tr>
</table>

2.4 Půda

Půda je základním přírodním zdrojem, na kterém je postavena celá naše civilizace. Na její kvalitě není závislá jen agronomická produkce jídla, ale je to jeden z faktorů přímo ovlivňujících i samotnou kvalitu našeho životního prostředí jako celku, a proto je udržení její vysoké kvality naprosto kritické pro další, především udržitelný rozvoj. Jedná se o pórovitou směs vzniklou smísením organické a anorganické minerální složky během velmi dlouhého období. Organická složka je tvořena z rozložených těl rostlin a živočichů a anorganická vznikla zvětráváním hornin. Půda je vlastně přímým důsledkem působení fyzických, chemických a biologických vlivů na organické zbytky, geologické materiály a dnes i z části na organické a anorganické materiály antropogenního původu, které pak mohou být i kontaminanty půdního prostředí. Základními funkcemi půdy z pohledu biosféry je poskytování životního prostředí pro organismy, krátkodobé ukládání vody, ukládání a redistribuce solární energie (absorpce tepla) a akumulace nutrientů. Toto ale nejsou její jediné funkce, protože se jedná o sféru velmi úzce provázanou se všemi ostatními sférami této planety (viz. Obrázek 9) a prochází přes ni téměř veškeré energetické a materiální toky. Díky tomu, že se tvoří velmi pomalu je velmi náchylná k degradaci a znečištění, a tak se jedná asi o nejzranitelnější sféru ze všech. Proces vzniku půdy určují dva základní parametry, kterými je zvětrávání a pedogeneze. Zvětrávání je změna geologických materiálů tvořících Zemský povrch (hornin) v důsledku atmosférických podmínek na malé částice, které se pak stávají anorganickou složkou půdy. Jedná se o samovolný proces, jelikož jím v podstatě dochází ke zvýšení entropie. Pedogeneze naopak entropii opět snižuje, protože víceméně izotropní materiál, regolit, vzniklý zvětráváním matečné horniny přetváří na velmi komplexní půdu. Jedná se o proces iniciovaný mikroorganismy a jde vlastně o sumu všech fyzikálních, chemických a právě i biologických procesů které vedou ke vzniku půdy [67].



Obrázek 9: Zjednodušené cykly energie a materiálu procházející přes půdu [67]

2.4.1 Složky půdy

Základními složkami půdy jsou krystalické nebo amorfní pevné látky anorganického původu (především alumino-silikáty, hydroxidy železa a uhličitany), organická složka tvořená živými i mrtvými organismy, přičemž nejdůležitější je část tvořená mikroorganismy. Dále pak tzv. půdní roztok s částí rozpuštěných organických i anorganických látek, který je domovem pro půdní mikroorganismy. Poslední složka je tvořena plyny běžně se vyskytujícími v Zemské atmosféře, jejichž obsah je ale ovlivněn chemickými a biochemickými reakcemi (například reakcemi způsobenými minerální vodou, dýcháním mikroorganismů a rozkladem organických látek) [67].

2.4.1.1 Anorganická složka

Kamenné a minerální částice tvořící tuto složku se výrazně liší ve svých velikostech, které se pohybují od částic v průměru v mikrometrech až po balvany třeba i s půlmetrovým průměrem. Podle velikosti se tedy rozdělují na štěrk, jehož velikosti v průměru částic se pohybují v rozmezí 200– 4,76 mm, dále na písek, jehož velikost zrn je od 4,76 do 0,074 mm. Poslední kategorií je prach a jíl které mají velikost částic od 0,074 mm a níže. Obecně lze říci, že štěrk a písek jsou složky půdy definované jako ty, které lze ještě rozlišit pouhým okem a prach s jílem jsou považovány za velmi jemnou složku půdy s částicemi z větší části tak malými, že pouhým okem nejdou rozeznat [68]. Toto rozdělení je blíže specifikováno mezinárodní normou ASTM D2487-17, která půdní částice rozděluje podle jejich průchodu nebo zadržením na standardizovaných sítech s definovanými velikostmi ok. Rozděluje je tedy na hrubý štěrk, který prochází sítem s oky o velikosti 75 mm, ale je zadržen na sítu s oky o velikosti 19 mm. Štěrk, který projde i tímto sítem a je zadržen na sítu s 4,75mm oky se nazývá jemný štěrk. Další frakcí je písek, který spadá do intervalu velikostí od 4,75 mm do 75 µm. Ten se dále rozděluje na hrubý (4,75 mm – 2 mm), střední (2 mm – 425 µm) a jemný (425 µm – 75 µm). Částice menší než 75 µm jsou pak rozděleny na prach, který jako vlhký nevykazuje žádné tvárné vlastnosti a jako suchý ani žádnou pevnost a jíl, který je definován jako soubor částic, které při různých vlhkostech vykazují plasticitu a při vysušení i poměrně vysokou pevnost [69]. Chemické složení této složky zahrnuje různé minerály tvořící především štěrk a písek (převážně silikáty obsahující ve své krystalové struktuře kationty kovů a polokovů jako je například Al, Fe, Ca, Mg, K a Na). Prach a jíl jsou pak tvořeny krystalickou složkou opět ze silikátů (fylosilikátů), ale také z volných oxidů, hydroxidů a solí kovů (Fe, Al, Mn, Ti), které mohou hrát roli například při výměně kationtů (viz. níže 2.4.4) [70].

2.4.1.2 Organická složka

Tato složka se skládá z 95 % z organických zbytků po tělech mrtvých organismů. Zbylých 5 % tvoří živé mikroorganismy, kořeny rostlin a půdní fauna. Jedná se o chemicky nejvíc aktivní složku půdy. Je zdrojem esenciálních prvků pro organismy (především C, N, S, P) a má největší podíl na výměně kationtů a pufrování pH. Také pozitivně ovlivňuje strukturu půdy, což přispívá k dobrému proudění vody a vzduchu skrze ni. Velmi intenzivně se také účastní koloběhu uhlíku v přírodě, ve kterém slouží jako jeho úložiště. Součástí této složky je

humus, který se obvykle definoval jako organický materiál, který již prošel transformací iniciované mikroorganismy do relativně stabilní formy nebo také jako komplexní polymer jehož složkami jsou huminové kyseliny, fulvonové kyseliny a huminy [71]. Bylo také teorií, že humus jako takový se skládá z mnoha různě pospojovaných aromatických jader substituovaných hydroxylovými skupinami převážně ve formě karboxylů a fenolů s výslednou molekulovou hmotností přesahující i 200 000 g/mol. Ovšem díky rozvoji *in situ* analýzy bylo zjištěno, že tyto makromolekuly se pravděpodobně tvoří až během extrakce alkáliemi a přímo v půdě se tyto složky humusu vyskytují spíše jako menší biomolekuly. Kromě humusu zde lze nalézt také některé specifické biomolekuly pocházející z bakterií (např. polysacharidy) nebo z hub (např. glykoprotein glomalín), tyto látky jsou důležité pro tvorbu a udržování stability půdních agregátů díky kterým se půda provzdušňuje [72].

2.4.1.3 Edafon

Jedná se o společenství bakterií, aktinomycet, hub, řas a virů, ale také větších organismů jako jsou například žížaly nebo krtci. Lze jej rozdělit na mikrofaunu zahrnující živočichy menší než 0,2 mm na délku a mikroflóru zahrnující půdní mikroorganismy. Dále na mesofaunu, která zahrnuje malé bezobratlovce (z kmenů členovců, kroužkovců, hlístic a měkkýšů). A poslední společenství makrofaunu, do které patří obratlovci žijící v zemi. Funkce edafonu spočívá v rozkladu organické hmoty, následné tvorbě humusu a nutrientů využitelných dalšími organismy a rostlinami [70].

2.4.2 Typy půd

Typů půd je velmi velké množství rozdělených podle mnoha parametrů vystihujících podmínky jejich vzniku a výskytu, nebo i dalších charakteristik jako je například obsah a vlastnosti organické a anorganické složky. Proto zde budou shrnuty pouze ty, kterými se tato práce bude zabývat níže v praktické části a které jsou relevantní pro Českou republiku.

2.4.2.1 Černozem

Černozemě jsou půdy s tlustou povrchovou vrstvou, která obsahuje velké množství organické složky zasahující do hloubky od 30 do 160 cm, díky čemuž se jedná se o nejúrodnější země na světě. Tvoří se na stepních travnatých plochách a prériích a největší oblasti s černozemí se vyskytují v okolí Velkých jezer v Severní Americe, v jižní Ukrajině, a nakonec ve středním Rusku a na Sibiři. Většina černozemí se skládá kromě organické složky ze směsi jemných částic jílu, středně velkých prachových částic a hrubých zrn písku. Tyto částice pocházejí z matečných hornin živce, slídy a ilitu, které jsou bohaté na draslík. Jílové částice těchto zemin jim poskytují vysokou pufrovací kapacitu a schopnost odolávat degradaci a erozi. Jejich pH se pohybuje mezi 6 a 7,5 [73].

2.4.2.2 Kambizem

Kambizemě jsou považovány za středně vyvinuté půdy s hnědou barvou, která značí probíhající pedogenezi a akumulaci organických látek, ale ne v takové míře jako u černozemí. Lze v nich nalézt ještě nezvětralé zbytky matečné horniny (například živce a ferromagnesianu), ze kterých může docházet k uvolňování železa, které následně tvoři hydroxidy ovlivňující půdní vlastnosti. Jíl se u těchto půd vyskytuje jen v menším množství. Vyskytují v nížinách i hornatém terénu ve všech klimatech a velmi často jsou agronomicky využívány. Další využití zahrnují například lesnictví nebo pastviny [67].

2.4.2.3 Fluvizem

Jedná se poměrně mladé, slabě vyvinuté půdy vytvořené v záplavovém okolí řek, ale i v okolí jezer a moří na sedimentech pocházejících z těchto vodních ploch. Díky tomu je můžeme najít ve všech podnebných pásmech. Jejich organická složka může být rozvrstvená nepravidelně v důsledku záplav a zanášení již vytvořeného organického horizontu dalším říčním sedimentem. Jsou tvořeny částicemi od velikosti hrubého písku až po velmi jemné částečky jílu. Barvu mívají závislou na podmínkách, a to nahnědlou, pokud v nich dochází spíše k oxidaci a našedlou, pokud k redukci. S výjimkou thio-fluvizemí, které jsou velmi kyselé v důsledku oxidace pyritu, jsou fluvizemě obecně pH neutrální. Velmi často využívají jako pastviny nebo pro zmírnění dopadů záplav a pokud se využívají pro pěstování plodin, tak je nutná kontrola vodního toku [67].

2.4.3 Úrodnost

Úrodnost závisí na mnoha parametrech půdy, a to jak fyzikálních (textura, struktura a schopnost zadržovat vodu), tak i chemických (pH, koncentrace biodostupných esenciálních nutrientů pro rostliny, kationtová kapacita) a specifických jako je její minerální složení a obsah organické hmoty. Úrodnost může být definována na základě právě těchto vlastností, nebo také na základě rychlosti růstu plodin a celkového výnosu z nich. Vlastnosti půdy mohou být upravovány, aby se dosáhlo co nejvyšší úrodnosti, tak aby podmínky v půdě byly optimální právě pro daný typ plodiny. Pro úpravu půd se využívá například vápnění, pokud její pH moc kyselé, nebo hnojení organickými hnojivy, pokud obsahuje málo organických látek [74].

2.4.4 Kationtová kapacita, pH a schopnost zadržovat vodu

Kationtová kapacita a schopnost půdy vyměňovat kationty je vyjádřením množství negativního náboje v milimolech vztaženého na jednotku hmotnosti půdy. Je z velké části určena obsahem jílu, který má koloidní povahu a je z větší části negativně nabitý, proto se na něj kationty sorbují. Dále kationtovou kapacitu ovlivňuje i obsah organické složky, která také nese negativně nabité funkční skupiny. S rostoucí kationtovou kapacitou se také zvyšuje úrodnost půdy díky zachycování kationtů prvků esenciálních pro růst rostlin a také díky ní má půda velkou schopnost zadržovat vodu. Čtyři základní kationty, které se účastní výměny mezi půdou a rostlinami v zemědělských půdách jsou Ca^{2+}, Mg^{2+}, Na^{+} a K^{+} [74].

pH půdy je dalším faktorem výrazně ovlivňujícím její úrodnost a určuje formu ve které se prvků esenciální pro růst rostlin vyskytují a tím i jejich biodostupnost. Je určeno koncentrací volných kationtů vodíku v půdním roztoku, které jsou v rovnováze s těmi sorbovanými na půdní koloidy (jíl a humus). Tyto koloidy se pak samy mohou chovat podobně jako atomy vodíku a ovlivňovat pH – snižovat jej. Koncentrace kationtů vodíku sorbovaných na tyto částice pak určuje pufrovací schopnost půd (odolnost vůči změně pH zásahy z vnějšku) [74].

Půdy mají obecně, až na výjimky poměrně vysokou schopnost zadržovat vodu. Část vody dostávající se do půd ať už mokrou depozicí, nebo umělým zavlažováním jimi sice protéká vlivem gravitace, a nakonec se dostává do vodních toků a ploch, ale velká část zůstává zachycena v půdních pórech, kde může být využita rostlinami a mikroorganismy. Tento mechanismus retence je proto silně ovlivněn velikostí částic, ze kterých se půda skládá, přičemž silnější schopnost retence mají jílovité částice oproti například pískovým částicím, přes které voda protéká velmi snadno a téměř se nezadržuje. Maximální množství vody, kterou je půda schopná udržet se nazývá polní vodní kapacitou a obsah vody, který už rostliny nedokáží z půdy absorbovat se nazývá bod vadnutí [74].

2.4.5 Změny v půdě vyvolané působením biouhlu

Přidávání biouhlu do půdy může mít vliv jak na její chemické, tak i fyzikální vlastnosti. Z chemických vlastností může biouhel ovlivňovat například pH půdy obecně jeho zvyšováním v důsledku obsahu alkálií (viz. bod 2.2.1.2) a to až i o 73 % oproti původní hodnotě. Existují ovšem i biouhly s kyselým pH (v závislosti na použitém vstupním materiálu a podmínkách pyrolýzy), které pak pH snižují. Obecně ale biouhly z pohledu pH fungují nejlépe v mírně kyselých a kyselých půdách. Biouhel zasahuje také do rovnováhy esenciálních nutrientů v půdě, zvyšováním jejich retence a tak i jejich biodostupného obsahu. Jejich retence se může zvyšovat v důsledku velkého specifického povrchu biouhlu a následné sorpce těchto esenciálních kationtů na jeho aktivní místa, tudíž biouhel může navyšovat i celkovou kationtovou kapacitu půdy. Fyzikálními vlastnostmi půdy které jsou ovlivněny biouhlem je především objemová hmotnost půdy a její schopnost zadržovat vodu. Objemová hmotnost se v důsledku velké porozity biouhlu snižuje, na druhou stranu ale díky ní dochází ke výraznému zvýšení schopnosti zadržovat vodu, a tak i k navýšení polní vodní kapacity. Každá aplikace biouhlu do půdy by ale měla být předem individuálně posouzena, protože existuje mnoho typů půd s rozdílnými vlastnostmi a stejně tak i biouhlu, tudíž jeho přidání do půdy může mít i přesně opačný efekt, než bylo zamýšleno a výše zmíněné vlastnosti tak mohou výt ovlivněny i negativně [73].

2.4.6 Osud organických kontaminantů v půdě

Pokud se některý z výše zmíněných organických polutantů (viz. body 2.3.1 – 2.3.3) dostane do půdy, může se zachovat následujícími způsoby:

- Vypaří se atmosféry bez chemické změny
- Adsorbuje se na půdní jílové částice nebo organickou složku
- Proteče skrze půdu v půdním roztoku až do saturované zóny nebo vodních toků
- Fotochemicky se rozloží na povrchu půdy (PAHs)
- Aerobně se rozloží díky působení mikroorganismů v horních částech půdy
- Anaerobně se rozloží působením mikroorganismů v saturované zóně podzemních vod
- Je vstřebán rostlinami nebo půdními živočichy a dostane se tak do potravního řetězce

Každý z těchto scénářů je určen chemickými vlastnostmi daného kontaminantu a také podmínkami v dané lokalitě. Vypaření do atmosféry například nemůžeme čekat u HMW PAHs, ale spíše u těch lehčích a těkavějších s vyšší tenzí par jako je například Naftalen. Dále je to možné i u některých pesticidů nebo složek benzínu.

Adsorpce na půdu je velmi silně závislá na vlastnostech půdy a samotného kontaminantu, přičemž nejsilnějším sorbentem těchto látek v půdě je organická složka. Síla adsorpce chemikálií na humus se zvyšuje s výskytem funkčních skupin jako například $-OH$, $-NH_2$, $-NHR$, $-CONH_2$, $-COOR$ a $-{}^{+}NR_3$ v jejich struktuře, díky kterým může docházet ke tvorbě vodíkových můstků nebo elektrostatickým interakcím. Dále může docházet i k $\pi-\pi$ interakcím mezi aromatickými jádry v humusu a těchto kontaminantech. Na negativně nabité jílové částice bývají přirozeně sorbované kationty vápníku a draslíku díky kterým jsou tyto částice ve výsledku velmi hydrofilní a bývají solvatovány vodou, což snižuje jejich schopnost sorbovat organické kontaminanty, ale pokud k sorpci dochází tak se na tyto částice sorbují spíše polárnější organické kontaminanty.

Průnik kontaminantů až do saturované zóny a jejich následné vymývání do vodních toků je silně ovlivněno jejich rozpustností ve vodě a sílou sorpce na půdní částice. K vymývání kontaminantů z půdy do saturované zóny dochází hlavně u písčitých půd s nízkým obsahem organických látek.

Mikrobiální degradace výše zmíněných kontaminantů je nejdůležitějším přirozeným způsobem jejich odstranění z půdy. Mikroorganismy tyto látky mohou využívat jako zdroj živin a přetvářet je na stavební kameny svých organel. Nebo tyto látky podléhají tzv. kometabolizmu, kdy je v některých případech rozkládají až na CO_2 nebo CH_4 a vodu, také se ale tímto způsobem mohou tvořit ještě komplexnější a potencionálně toxičtější látky, které se pak akumulují. Biochemické reakce jsou značně rozdílné v aerobním a anaerobním prostředí, ale obecně nejprve dochází k odštěpování substituenů z aromatického jádra a až posléze k rozštěpení jádra samotného. Poměrně důležité jsou například některé půdní houby jejichž enzymy, které tyto houby běžně používají na rozklad ligninu, jsou schopné rozkládat i organické kontaminanty. Problémem v aerobním prostředí je enzymatické odštěpení substituovaného chlóru, které v těchto podmínkách probíhá velmi pomalu a je příčinou dlouhé

perzistence chlorovaných kontaminantů v tomto půdním prostředí. Mnohem rychleji ale probíhá v anaerobních podmínkách, kde anaerobní bakterie využívají reduktivní dehalogenace [72]. Rychlost těchto reakcí je také značně ovlivněna biodostupností těchto kontaminantů, která u těch sorbovaných na půdní koloidy není moc velká. Některé mikroorganismy toto překonávají tvorbou biosurfaktantů a emulgujících látek (polysacharidy a jejich komplexy s proteiny, nebo glykolipidy), díky kterým mohou tyto kontaminanty tvořit mikrokapičky v půdním roztoku, které jsou již lépe dostupné.

Uvolnění kontaminantů z půdních částic podporují také rostliny a půdní živočichové, kdy v zažívacím traktu živočichů může docházet k jejich uvolnění působením kyselin a následnému vstřebávání. Rostliny pak přispívají k jejich uvolnění působením svými kořeny, které ve snaze z půdy získat nutrienty ovlivňují její vlastnosti v jejich bezprostřední blízkosti exkrecí různých látek ovlivňujících například půdní pH, redoxní potenciál a nebo koncentraci makronutrientů a organických látek, což může posléze vést i ke zvýšení biodostupnosti půdních kontaminantů a jejich následnému vstřebávání [75].

K uvolnění kontaminantů z biouhlu může docházet podobnými způsoby a byť jsou sorpční schopnosti biouhlu poměrně velké, mohou začít časem slábnout díky akumulaci přírodní organické hmoty a lipidů v jeho pórech. V důsledku toho může docházet k uvolnění původně imobilizovaných kontaminantů a jejich vstupu do půdního ekosystému a posléze i potravního řetězce, kde se pak projevují jejich negativní účinky již zmíněné výše (viz. body 2.3.1 až 2.3.3) [76].

3 Cíl práce

Cílem této práce byla extrakce skupiny polycyklických aromatických sloučenin, polychlorovaných bifenylů a volatilních organických sloučenin ze vzorků biouhlu a půdy a vyhodnocení půdní kontaminace těmito látkami. V rámci této diplomové práce byly řešeny následující dílčí cíle:

- Literární rešerše
- Optimalizace extrakční metody pro PAH a PCB sloučeniny pomocí PSE extraktoru
- Optimalizace termální desorpce s využitím elektrické trubkové pece
- Extrakce všech těchto látek ze vzorků biouhlu a půdy nejvhodnější extrakční metodou
- Koncová analýza těchto extraktů pomocí GC–MS
- Vyhodnocení výsledků a diskuze

4 Experimentální část

4.1 Použité chemikálie a materiál

- Dichlormethan pro HPLC, VWR international (USA)
- Toluen pro HPLC, VWR international (USA)
- Hydromatrix, Agilent Technologies (USA)
- Skleněné kuličky 2,5 – 3,5 mm, Sigma Aldrich s.r.o. (USA)
- PTFE stříkačkové filtry, Chromservis (ČR)
- Dusík – 4,7, SIAD (Itálie)
- Helium – 6,0, SIAD (Itálie)
- Argon – 5,0, SIAD (Itálie)

4.2 Použité standardy

- PAH standard – 38 sloučenin, Absolute Standards Inc. (USA)

Tabulka 3: Látky obsažené ve směsném standardu PAHs

Benzofuran	Indan	Inden	Naftalen
Chinolin	2 – methylnaftalen	Isochinolin	1 – methylnaftalen
Benzo[b]thiofen	Indol	Bifenyl	2,6 – dimethylnaftalen
Acenaftylen	Acenaften	Dibenzofuran	2,3,6 – trimethylnaftalen
Fluoren	Dibenzothiofen	Fenantren	Antracen
Akridin	Fenanthridin	Karbazol	1 – methylfenantren
Fluoranten	Pyren	Benzo[a]antracen	Chrysen
Benzo[b]fluoranten	7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	Benzo[k]fluoranthen	Benzo[e]pyren
Perylen	Benzo[a]pyren	3 – methylcholanthren	Dibenzo[a,h]antracen
Indeno[1,2,3 – cd]pyren	Benzo[ghi]perylen		

- PCB mix 1, Dr. Ehrenstorfer GmbH (Německo)

Tabulka 4: Látky obsažené ve směsném standardu PCB

1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	1,1‘-Bifenyl, 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-

- PCB 118 – 2,3′,4,4′,5′-pentachlorbifenyl, Dr. Ehrenstorfer GmbH (Německo)
- Deuterovaný PAH standard, 5 sloučenin, Absolute Standards Inc. (USA)

Tabulka 5: Látky obsažené ve směsném standardu deuterovaných PAHs

Naftalen – D8	Acenaften – D10	Fenanthren – D10
Chrysen – D12	Perylen – D12	

- Referenční materiál (PAHs, PCBs na sedimentu), Sigma Aldrich s.r.o. (USA)
- n-Alkany C8 – C40, Sigma Aldrich s.r.o. (USA)

4.3 Přístroje a pomůcky

- Analytické váhy Kern 770, Kern & Sohn (Německo)
- Oscilační mlýn MM 200, Retsch GmbH (Německo)
- Analytické síto s otvory 1 mm, Retsch GmbH (Německo)
- Trubková pec elektrická, HP servis pece s.r.o. (ČR)
- Rozvodná skřín s PID regulátorem HT 40 B, HP servis pece s.r.o. (ČR)
- Extraktor one PSE, Applied Separations Inc. (USA)
- Vakuová rotační odparka Rotavapor R-205, Büchi Labortechnik AG (Německo)
- Vodní lázeň vyhřívaná, V-800, Büchi Labortechnik AG (Německo)
- Plynový chromatogram SCION 436, Bruker (USA)
    - Kolona Restek Rxi-PAH (30 m x 0,25mmID x 0,1 µm df), Restek (USA)
- Hmotnostní spektrometr: EVOQ TQ, Bruker (USA)
- Plynový chromatograf 6890N Network GC system, Agilent Technologies (USA)
    - Restek Rxi-5MS (30 m x 0,25 mmID x 0,25 µm df)
    - BPX50 (1,2 m x 0,1 mmID x 0,1 µm df)
- Hmotnostní spektrometr Pegasus IVD, LECO corporation (USA)

4.4 Vzorky biouhlu

Tabulka 6: Použité vzorky biouhlu

Biouhel	Producent	Vstupní materiál	Podmínky pyrolýzy
Káňa	Biouhel CZ s.r.o. (ČR)	Kukuřičný digestát	20 – 30 min při 450 – 470 °C
		Pšeničná sláma	
		Travní biomasa	
Sonnenerde	Sonnenerde GmbH	Kukuřičné a slunečnicové slupky	20 min při max. 650 °C
		Ovocný kal	
Novoterra	NovoCarbo GmbH	Měkké a řezané dřevo	10 min při max. 720 °C

Přičemž biouhly Sonnenerde a Novoterra splňovaly podmínky pro certifikát EBC Agro (viz. Tabulka 2).

4.5 Vzorky půd

V této diplomové práci byly analyzovány celkem 4 vzorky půd se kterými bylo dříve pracováno v roce 2021 v bakalářské práci Natálie Štorkové [77], ve které byl sledován vliv přidávání biouhlu do půdy na kontrolovanou kultivaci kukuřice seté. Výše zmíněné biouhly Sonnenerde a Novoterra zde interagovaly s půdním ekosystémem a rostlinami kukuřice v květináčích po dobu vždy 3 měsíců opakovaně, celkově po dobu roku a půl. Do půdy byly přidávány v sáčcích z polypropylenové textilie, aby je následně bylo možné oddělit od půdy a analyzovat půdu a biouhel zvlášť. Půdy používané v této práci byly:

- TA ČR (písčitá aridní půda) z lokality Hodonín – Pánov (48.878150°N, 17.132275°E)
- Černozem z Žabčic u Brna (49.006433°N, 16.591367°E)
- Kambizem z Náměště nad Oslavou (49.213263°N, 16.162481°E)
- Fluvizem z Ivaně (49.921686°N, 16.561494°E)

Kdy první tři byly odebrány 28. 05. 2020 a poslední 05. 10. 2019.

4.6 Příprava kalibrační závislosti

Pro přípravu kalibrační závislosti byly použity směsné standardy 38 PAHs, 6 PCB a pro úplnost byl ještě přimícháván standard PCB 118, který ve směsném standardu PCB chyběl. Tyto standardy byly ředěny pomocí toluenu na přesné koncentrace (viz. Tabulka 7). Nakonec byl k takto připraveným roztokům přikápnut naředěný roztok směsného standardu deuterovaných PAHs tak, aby jeho výsledná koncentrace v každém bodě kalibrační křivky činila 100 ng/ml.

Tabulka 7: Koncentrace jednotlivých bodu koncentrační řady

Číslo kalibračního roztoku	Koncentrace PAH [ng/ml]	Koncentrace PCB [ng/ml]
1	0,1	0,1
2	0,5	0,5
3	1	1
4	10	10
5	25	25
6	50	50
7	100	100
8	250	250
9	500	–
10	750	–
11	1000	–
12	2000	–

4.7 Optimalizace extrakcí

4.7.1 Příprava vzorků

Především vzorky půd byly značně nehomogenní povahy a obsahovaly různě velké půdní agregáty a kamínky. To bylo vyřešeno nadrcením větších částic půdy v třecí misce a následným přesítováním přes síto s oky o velikosti 1 mm. Tato podsítná frakce byla následně extrahována. Po každém sítování bylo také nutné síto a třecí misku opláchnout a vysušit, aby se zabránilo přenosu částic a analytů mezi jednotlivými vzorky. Vzorky biouhlu už byly předem namlety na částice menší než 0,5 mm. Pro optimalizaci extrakcí byl používán biouhel Káňa od společnosti Agrouhel.

4.7.2 Extrakce s využitím termální desorpce

Při tomto typu extrakce byla využívána trubková pec s elektrickým ohřevem se vsunutou skleněnou pyrolyzní trubicí, do které se pak umisťovala lodička se vzorkem. Optimalizována byla teplota, při které termální desorpce probíhala, čas během kterého bylo za této konstantní teploty extrahováno a také průtok dusíku. Vždy bylo do lodičky naváženo 0,5 g vzorku biouhlu, který v ní byl rovnoměrně rozprostřen pomocí skelněné tyčinky tak aby tvořil souvislou zhruba stejně tlustou vrstvu (viz. Obrázek 10). Dále k němu bylo přikápnuto 10 µl směsi naředěných deuterovaných standardů tak, aby celkové množství přidávaného standardu činilo 100 ng. Takto připravená lodička pak byla umístěna pomocí drátku do pyrolyzní trubice.

Obrázek 10: Lodička s naváženým vzorkem

Po umístění lodičky do pyrolyzní trubice byla na konec aparatury napojena promývací lahev s 200 ml dichlormethanu a na začátek tlaková lahev s dusíkem, pro zajištění inertní atmosféry v průběhu termální desorpce (viz. Obrázek 11). Na tomto obrázku sice není, ale byla používána i hliníková fólie, kterou byla obalena část trubice vystupující z elektrické pece a také nástavec na promývací lahev, kvůli zabránění rychlého ochlazování desorbovaných analytů a jejich následné kondenzaci na stěnách trubice. Po provedení průplachu dusíkem a odstranění kyslíku z aparatury byl průtok dusíku upraven pomocí průtokoměru a redukčního ventilu na požadovaný, podle čísla experimentu. Parametry jednotlivých experimentů jsou uvedeny níže (viz. Tabulka 8). Nakonec byl zapnut teplotní program pro daný experiment a bylo ponecháno extrahovat. Po uplynutí doby, po kterou se měla držet konstantní teplota, byla promývací lahev od aparatury odpojena a zavřena. Lodička se vzorkem byla vytažena pomocí drátku a na trubici byla napojena místo dusíku trubice z rozvodu vzduchu pro rychlejší ochlazení. Lodička, pyrolyzní trubice a nástavec vedoucí do promývací lahve byly po každé extrakci po vychladnutí umyty a vysušeny, aby se zabránilo umělému navyšování koncentrací analytů v následujících vzorcích. Extrakt v dichlormethanu byl následně kvantitativně převeden do odpařovací baňky a zakoncentrován na vakuové rotační odparce (viz. Obrázek 11). Nakonec byl odpařen do poslední kapky (z důvodu minimalizace ztrát těkavějších analytů) pod mírným proudem dusíku. Takto zakoncentrovaný vzorek byl nakonec rozpuštěn v 1 ml toluenu a pomocí Pasteurovy pipety převeden do vialky, která byla uchovávána v lednici pro pozdější měření. Kromě extrakcí vzorků byl také pro každou teplotu proveden blank, při kterém byla do trubice umístěna pouze prázdná, umytá lodička. Celá sada uvedená níže (viz. Tabulka 8) byla provedena pouze při teplotě 300 °C, při které byla nalezena kombinace ideálního průtoku dusíku a času extrakce. Po určení těchto dvou

parametrů s nimi bylo pracováno dále při sledování vlivu teploty a byly provedeny extrakce při teplotě 400 a 500 °C. Gradient teploty byl ponechán konstantní na 20 °C/min. Optimální extrakce pak byla provedena ve třech opakováních pro ověření správnosti.

Obrázek 11: Aparatura s trubkovou pecí a vakuová rotační odparka

Tabulka 8: Parametry jednotlivých experimentů pro každou teplotu termální desorpce

Č. vzorku	Průtok dusíku [ml/min]	Čas extrakce [min]
1	100	10
2	100	20
3	100	30
4	300	10
5	300	20
6	300	30
7	500	10
8	500	20
9	500	30

4.7.3 PSE extrakce

Tento typ extrakce byl prováděn s využitím PSE extraktoru. Optimalizována byla teplota během které extrakce probíhala a čas jednotlivých extrakčních cyklů (viz. Tabulka 9). Konstantními parametry během extrakce byly počty extrakčních cyklů (každá extrakce probíhala ve třech cyklech) a také tlak, který byl z důvodu limitace přístroje ponechán konstantní, maximální možný a to 90 bar. Pro každou extrakci bylo naváženo 0,5 g vzorku do malé kádinky. K tomuto vzorku bylo následně přimícháno přibližně stejné objemové množství hydromatrix, která měla zabraňovat spékání vzorku během extrakce, vyplňovala prostor extrakční patrony a také napomáhala částečnému přečištění vzorku. Tento vzorek byl následně kvantitativně převeden do kovové extrakční patrony, která byla vždy předchystána tak, že ve spodní části byl kromě frity ještě vystřižený filtrační papír, který tuto fritu měl chránit před zanášením vzorkem. Obě tyto části byly zespodu upevněny matičkou. Krom toho byla do extrakční patrony na dno přidána také zhruba jedna malá lžička skleněných kuliček tak, aby se vzorek nacházel zhruba uprostřed patrony. Po kvantitativním převedení vzorku do patrony k němu bylo přikápnuto 10 µl roztoku směsi deuterovaných standardů o koncentraci 10 µg/ml, takže celkové množství přidávaného standardu ke vzorku bylo 100 ng. Takto připravený vzorek v patroně byl nakonec zasypán skleněnými kuličkami až do výšky cca dvou centimetrů pod horní okraj patrony. Ta byla nakonec vložena do extraktoru a byl spuštěn příslušný program. Po ukončení programu byl extrakt z vialky kvantitativně převeden do odpařovací baňky a pomocí vakuové rotační odparky zakoncentrován na co nejmenší objem, který byl následně odpařen do poslední kapky pod proudem dusíku, stejně jako u extrakce pomocí termální desorpce. Takto zakoncentrovaný vzorek pak byl rozpuštěn v 1 ml toluenu a pomocí Pasteurovy pipety převeden do přichystané stříkačky s PTFE stříkačkovým filtrem přes který byl extrakt protlačen. Pomocí tohoto stříkačkového filtru byly od extraktu odfiltrovány velmi jemné částečky biouhlu, které se dostaly přes filtrační papír, i fritu až do extraktu. Vialka s takto přefiltrovaným extraktem byla skladována v lednici pro pozdější analýzu. Blank pro tuto metodu byl proveden stejným postupem, pouze bez vzorku a jen s hydromatrix. Optimální extrakce pak byla provedena ve třech opakováních pro ověření správnosti a pro porovnání byla provedena i extrakce s využitím normovaného toluenu, při již stanovených optimálních podmínkách, také v triplikátu.

Tabulka 9: Parametry PSE experimentů

Č. vzorku	Teplota [°C]	Čas extrakčního cyklu [min]
1	90	10
2	90	15
3	90	20
4	110	10
5	110	15
6	110	20
7	130	10
8	130	15
9	130	20

4.8 Analýza extraktů pomocí plynové chromatografie s hmotnostní detekcí

4.8.1 Kvalitativní stanovení všech látek s využitím GC-TOF

Kvalitativní analýza byla provedena na plynovém chromatografu 6890N od Agilent Technologies ve spojení s TOF hmotnostním analyzátorem Pegasus IVD od společnosti LECO. Byly měřeny nejlepší vzorky z optimalizace obou extrakcí, které byly změřeny pouze v 1D režimu a následně při analýze reálných vzorků byla změřena sada PSE extraktů z nejkontaminovanější půdy a biouhlu v režimu 2D. U obou režimů měření bylo každému analytu ve vzorku změřeno celé hmotnostní spektrum. Konkrétní parametry separace na plynovém chromatografu a nastavení hmotnostního analyzátoru jsou uvedeny níže (viz. Tabulka 10 a Tabulka 11). Pro spolehlivější identifikaci jednotlivých látek byl na tomto přístroji změřen také směsný standard n-Alkanů (C8 – C40), kdy retenční časy a retenční indexy těchto jednotlivých alkanů byly využity pro určení retenčních indexů jednotlivých látek ve vzorcích.

Tabulka 10: Podmínky 1D kvalitativní analýzy

Objem splitless nástřiku	1 µl
Teplota v injektoru	280 °C
Průtok nosného plynu He (konstantní)	1 ml/min
Primární kolona	Restek Rxi-5MS (30 m x 0,25 mmID x 0,25 µm df)
Sekundární kolona	BPX50 (1,2 m x 0,1 mmID x 0,1 µm df)
Doba analýzy	33 min
Teplotní program	Po dobu 1 min 95 °C
	Nárůst gradientem 10 C/min na 320 °C
Offset teploty v sekundární koloně	+5 °C
Teplota v iontovém zdroji	250 °C
Teplota v transferline	280 °C
Energie ionizačních elektronů	70 V
Rozsah skenovaných m/z	29 – 400
Rychlost skenování	15 Spekter/s
Napětí na detektoru	1650 V

Tabulka 11: Podmínky 2D kvalitativní analýzy

Objem splitless nástřiku	1 µl
Teplota v injektoru	280 °C
Průtok nosného plynu He (konstantní)	1 ml/min
Primární kolona	Restek Rxi-5MS (30 m x 0,25 mmID x 0,25 µm df)
Sekundární kolona	BPX50 (1,2 m x 0,1 mmID x 0,1 µm df)
Doba analýzy	33 min
Teplotní program	Po dobu 1 min 95 °C
	Nárůst gradientem 10 C/min na 320 °C
Offset teploty na sekundární koloně	+5 °C
Offset teploty modulátoru	+15 °C
Modulační perioda	4 s
Doba horkého pulzu	1,1 s
Doba studeného pulzu	0,9 s
Teplota v transferline	280 °C
Teplota v iontovém zdroji	250 °C
Energie ionizačních elektronů	–70 V
Rozsah skenovaných m/z	29 – 400
Rychlost skenování	150 Spekter/s
Napětí na detektoru	1650 V

4.8.2 Kvantitativní stanovení vybrané skupiny sloučenin s využitím GC-MS^2

Pro vytvoření metody na kvantitativní stanovení vybraných látek byl nejprve změřen bod kalibrační křivky s nejvyšší koncentrací v režimu SCAN, kdy bylo pro každý analyt změřeno celé hmotnostní spektrum, pomocí kterého byl identifikován porovnáním s knihovnou spekter. Z tohoto spektra byl poté každému analytu vybrán kvantifikační iont s nejvyšší intenzitou, alespoň jeden kvalifikační iont a byl vypočten jejich iontový poměr. Takto vytvořená MRM metoda byla poté používána pro měření všech dalších vzorků. Konkrétní nastavení plynového chromatografu je uvedeno níže (viz. Tabulka 12) a určené MRM parametry jednotlivých analytů také (viz. Přílohy, Tabulka 15).

Tabulka 12: Parametry chromatografické separace na chromatografu Bruker

Objem splitless nástřiku	1 µl
Teplota v injektoru	270 °C
Teplota v iontovém zdroji	250 °C
Průtok nosného plynu (konstantní)	1,2 ml/min
Kolona	Restek Rxi-PAH (30 m x 0,25mmID x 0,1 µm df)
Doba analýzy	30,33 min
Teplotní program	Konstantní teplota 80 °C po dobu 1 min
	Nárůst gradientem 15 °C/min na 250 °C
	Konstantní teplota 250 °C po dobu 7 min
	Nárůst gradientem 10 °C/min na 340 °C
	Konstantní teplota 340 °C po dobu 2 min

5 Výsledky a diskuse

5.1 Vyhodnocení přichystané kalibrační závislosti a určení LOD a LOQ

Přichystaná kalibrační řada byla po změření vyhodnocena v programu TASQ od společnosti Bruker, ve kterém byla vytvořena kalibrační závislost, do které byly následně dosazovány naměřené hodnoty ve vzorcích. Hodnoty bodů těchto kalibračních závislostí pro každý analyt byly následně exportovány do programu Excel od společnosti Microsoft, ve kterém byly z těchto kalibračních závislostí spočítány meze detekce (LOD) a meze stanovitelnosti (LOQ) pomocí Německé normy DIN 32645 [78], která určuje tyto meze pomocí výpočtu standartní odchylky opakovaného měření blank vzorků a následného dosazení do dalších rovnic uvedených níže.

$$s_{blank} = smodch_{blank} \cdot \sqrt{n} \tag{4}$$

$$LOD = 6 \cdot \frac{s_{blank}}{b} \tag{5}$$

$$LOQ = 9 \cdot \frac{s_{blank}}{b} \tag{6}$$

Kde $smodch_{blank}$ je směrodatná odchylka naměřených ploch daného analytu v blank vzorku, n je počet měření blank vzorků, s_{blank} je standartní odchylka opakovaných měření blank vzorků a b je směrnice kalibrační přímky. Kalibrační řada nebyla měřena pouze jednou, ale bylo nutné ji měřit při každém měření vzorků, aby byla jejich kvantifikace co nejspolehlivější a vždy se v daném Excelu pouze změnily koeficienty naměřené kalibrační závislosti, podle kterých se pak kvantifikovaly analyty. Proto se reálné vzorky měřily všechny najednou v jedné sekvenci, aby mohly být i co nejspolehlivěji určeny jejich meze detekce a stanovitelnosti. Bylo i sledováno chování přístroje při měření tak velkého množství vzorků (paměťový efekt přístroje) pomocí opakovaného měření vybraných bodů kalibrační závislosti a blanků z čehož bylo zjištěno, že nedochází k významným změnám v přesnosti. Meze detekce a stanovitelnosti v takto měřených reálných vzorcích jednotlivých analytů jsou uvedeny v následující tabulce.

Tabulka 13: LOD a LOQ jednotlivých analytů v reálných vzorcích

Analyt	LOD [ng/ml]	LOQ [ng/ml]	Analyt	LOD [ng/ml	LOQ [ng/ml]
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,10	0,15	Chrysen	1,7	2,6
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,10	0,15	Dibenzo[a,h]antracen	2,0	3,0
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,10	0,15	Dibenzofuran	0,10	0,15
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,10	0,15	Dibenzothiofen	0,10	0,15
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,10	0,15	Fluoranten	1,2	1,8

Tabulka 14: Pokračování LOD a LOQ jednotlivých analytů v reálných vzorcích

Analyt	LOD [ng/ml]	LOQ [ng/ml]	Analyt	LOD [ng/ml	LOQ [ng/ml]
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,10	0,15	Fluoren	0,4	0,6
1,1‘-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,10	0,15	Indan	0,8	1,2
3 – methylcholanthren	0,7	1,0	Inden	0,3	0,5
Acenaften	0,10	0,15	Indeno [1,2,3 – cd] pyren	1,9	2,9
Acenaftylen	0,2	0,3	Indol	0,4	0,6
Akridin	0,10	0,15	Isochinolin	0,9	1,3
Antracen	0,3	0,5	Naftalen	0,4	0,5
Benzo[a]antracen	0,6	0,9	1 – methylnaftalen	0,16	0,24
7,12 – dimethyl benzo[a]antracen	0,6	0,9	2,3,6 – trimethylnaftalen	0,10	0,15
Benzo[a]pyren	2,1	3,2	2,6 – dimethylnaftalen	0,3	0,4
Benzo[b]fluoranten	1,3	1,9	2 – methylnaftalen	0,15	0,23
Benzo[ghi]perylen	3,4	5,1	Perylen	0,9	1,4
Benzo[k]fluoranten	0,8	1,3	Fenantren	0,4	0,6
Benzo[b]thiofen	0,10	0,15	1 – methylfenantren	0,2	0,4
Benzo[e]pyren	1,7	2,6	Fenanthridin	0,2	0,3
Benzofuran	0,5	0,8	Pyren	0,2	0,3
Bifenyl	0,2	0,4	Chinolin	0,5	0,8
Karbazol	0,6	0,9			

U všech polychlorovaných bifenylů, některých PAHs s heteroatomy a Acenaftenu s 2,3,6 – trimethylnaftalenem vycházely podle výše zmíněného způsobu nižší limity detekce, než byl skutečně změřený nejnižší bod kalibrační závislosti. Proto byla za limit detekce dosazena koncentrace v nejnižším bodě kalibrační křivky a z této koncentrace pak byla vypočtena mez stanovitelnosti vynásobením koeficientem 9/6, což vyplývá z rovnic uvedených na předchozí straně. Takto byla těmto látkám určena mez detekce na 0,1 ng/ml a mez stanovitelnosti na 0,15 ng/ml. U zbylých látek bylo dosaženo limitů detekce v rozmezí 0,15 – 3,4 ng/ml a meze stanovitelnosti se pak pohybovaly mezi 0,23 ng/ml a 5,1 ng/ml.

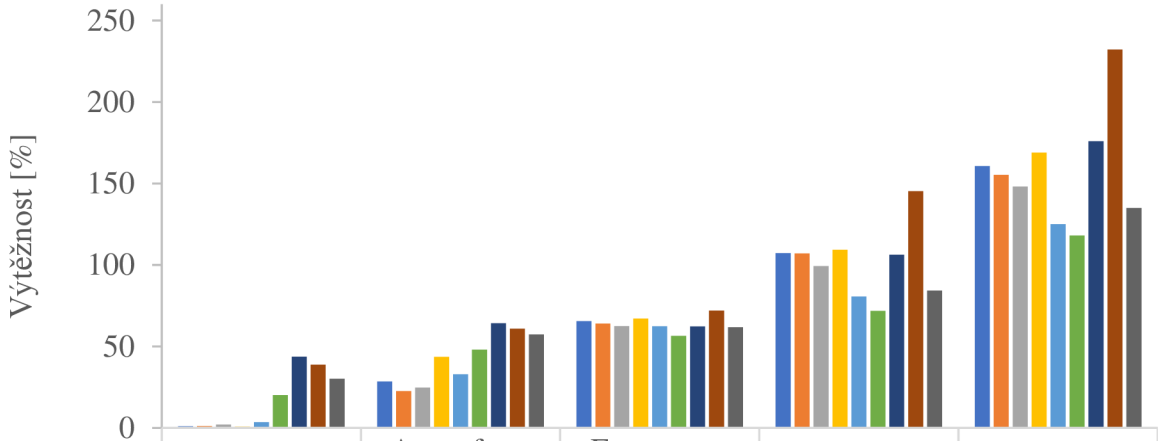
5.2 Optimalizace

5.2.1 Vyhodnocení optimalizace PSE extrakce

5.2.1.1 Výtěžnosti vnitřních standardů a skupin stanovovaných analytů

Po provedení řady experimentů s měnícími se podmínkami extrakce uvedenými výše (viz. bod 4.7.3) a jejich změření bylo zjištěno, že optimálními podmínkami byla teplota 130 °C, tlak 90 barů (konstantní u všech extrakcí) a 10 min na jeden extrakční cyklus. Byly

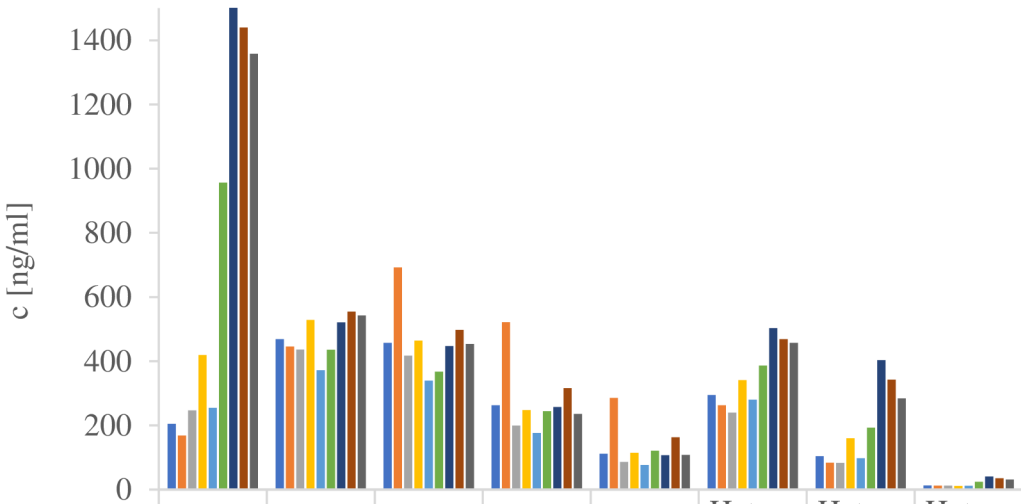
sledovány výtěžnosti vnitřních standardů, ale i celkové výtěžnosti všech stanovovaných látek, přičemž byla zvlášť sledována skupina PCBs a zvlášť skupina PAHs, která byla dále členěna podle počtu cyklu v molekule a podle přítomnosti heteroatomu.



	Naftalen-D8	Acenaften-D10	Fenantren-D12	Chrysen-D12	Perylen-D12
90 °C 10 min	1,0	28	65	107	161
90 °C 15 min	1,1	23	64	107	155
90 °C 20 min	2,1	25	62	99	148
110 °C 10 min	0,6	44	67	109	169
110 °C 15 min	3,5	33	62	81	125
110 °C 20 min	20	48	56	72	118
130 °C 10 min	44	64	62	106	176
130 °C 15 min	39	61	72	145	232
130 °C 20 min	30	57	62	84	135

Obrázek 12: Výtěžnosti vnitřních standardů v optimalizaci PSE extrakce

Na grafu výše jsou uvedeny výtěžnosti vnitřních standardů tohoto extrakčního procesu, které jsou zároveň jejich naměřenými koncentracemi, jelikož bylo ke vzorkům přidáváno celkové množství vnitřního standardu 100 ng a výsledný objem extraktu byl 1 ml. U vnitřního standardu Naftalenu (2 cykly) lze pozorovat jednoznačný narůstající trend, až do extrakce při 130 °C a 10 min trvajícím extrakčním cyklu, poté již začalo docházet k poklesům výtěžnosti. Stejný trend lze pozorovat i u výtěžností deuterovaného Acenaftenu (3 cykly). Fenantren skládající se také ze 3 cyklů ovšem vykazoval přibližně stejné výtěžnosti při všech podmínkách extrakce. Výtěžnosti těžších vnitřních standardů Chrysenu (4 cykly) a Perylenu (5 cyklů) měly navzájem podobné trendy, které ale již nebyly tak jednoznačné jako u předchozích, lehčích, vnitřních standardů. Nejprve docházelo k poklesům výtěžností, opět až do extrakce při 130 °C po dobu 10 min na extrakční cyklus, při které došlo k nárůstu, který se ještě zvýšil u následující extrakce. Zde již ale byla výtěžnost nad 100 %, což znamenalo pozitivní chybu metody a proto byla jako optimální vybrána extrakce, která měla tuto chybu co nejmenší, zvláště v případě Perylenu. Zároveň ale byla vybrána tak, aby byla nejlepší pro extrakci lehčích PAHs. Vliv na výběr optimálních extrakčních podmínek měly také konkrétní koncentrace skupin analytů, které jsou zmíněny níže.



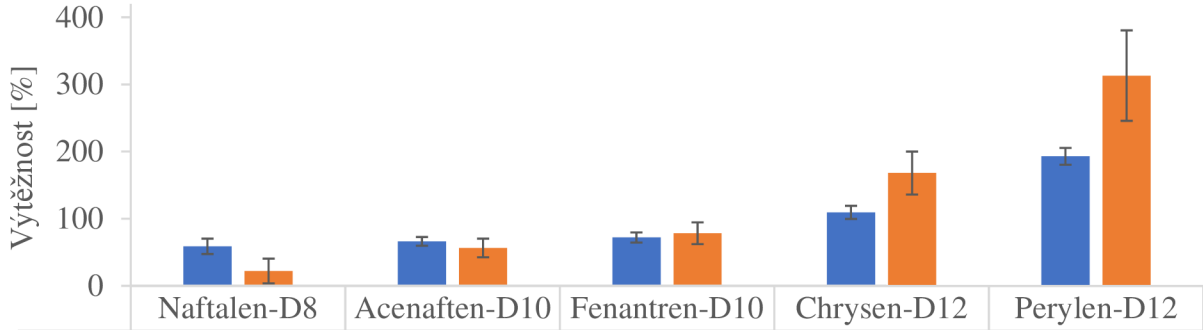
	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
90 °C 10 min	205	469	457	263	111	295	104	12	1,3
90 °C 15 min	168	445	692	522	286	263	83	12	1,2
90 °C 20 min	247	436	417	199	86	240	83	12	1,2
110 °C 10 min	420	528	464	248	114	341	159	11	1,2
110 °C 15 min	255	372	340	176	76	280	97	12	1,2
110 °C 20 min	956	436	368	244	121	386	193	24	1,1
130 °C 10 min	1792	521	447	257	107	503	403	40	1,2
130 °C 15 min	1440	554	497	316	162	469	342	35	1,2
130 °C 20 min	1358	542	454	236	108	457	284	31	1,2

Obrázek 13: Koncentrace jednotlivých skupin analytů v optimalizaci PSE extrakce

Při podrobnějším rozboru naměřených koncentrací všech analytů ve vzorcích bylo zjištěno, že trendy zmíněné na předchozí stránce platí i co se přímých koncentrací konkrétních analytů týče. Koncentrace sloučenin se dvěma cykly v molekule opět narůstaly a byly nejvyšší při 130 °C a 10minutovém extrakčním cyklu. PAHs se třemi cykly se opět chovaly podobně, ale prodloužení extrakčních cyklů mírně zvyšovalo jejich celkovou koncentraci. Celková koncentrace všech těžších PAHs (se 4, 5 i 6 cykly) byla překvapivě nejvyšší při nejnižší extrakční teplotě 15minutovém extrakčním cyklu. Ale vzhledem k tomu, že koncentrace dalších látek jako PAHs s heteroatomy dusíku, kyslíku nebo síry byly opět nejvyšší u extrakce při 130 °C a 10minutovém cyklu, byla zvolena tyto podmínky jako optimální i podle individuálního posouzení konkrétních koncentrací skupin látek. Výhodná byla také její menší časová náročnost. Koncentrace každé stanovované látky v této optimalizaci jsou uvedeny v přílohách (viz. Tabulka 16).

5.2.1.2 *Porovnání dichlormethanu a toluenu jako rozpouštědel pro extrakci*

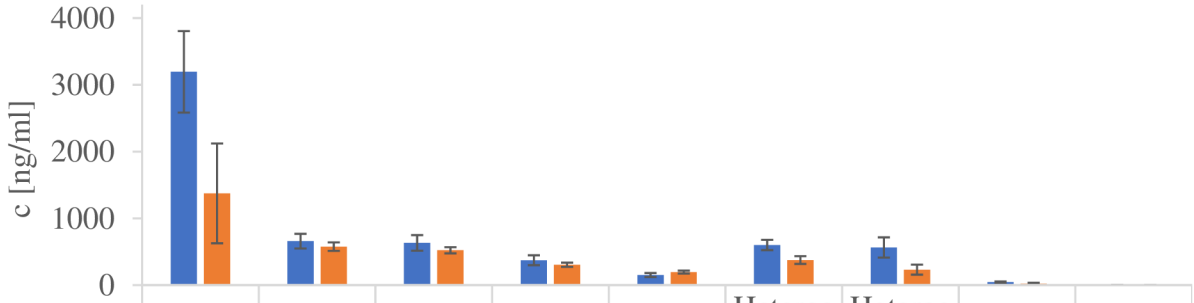
Jak bylo zmíněno v literární rešerši (viz. bod 2.3.8) pro extrakce PAH sloučenin z biouhlu je jako rozpouštědlo normovaný toluen. Z tohoto důvodu byla provedena také extrakce s využitím právě toluenu, která byla následně porovnána s nejlepší extrakcí pomocí dichlormethanu. Bylo zjištěno, že výtěžnosti těžších vnitřních standardů u extraktů pomocí dichlormethanu byly zatíženy menší pozitivní chybou a zároveň tyto extrakty poskytovaly vyšší výtěžnosti lehkých PAHs v porovnání s toluenem (viz. Obrázek 14).



	Naftalen-D8	Acenaften-D10	Fenantren-D10	Chrysen-D12	Perylen-D12
DCM	59	66	72	109	193
TOL	22	56	78	168	313

Obrázek 14: Porovnání výtěžností vnitřních standardů u dichlormethanu a toluenu

Rozbor koncentrací jednotlivých skupin analytů v následujícím grafu ještě více prohloubil tyto rozdíly a potvrdil vhodnost dichlormethanu jako rozpouštědla pro tuto extrakční techniku. Všechny skupiny analytů vykazovaly vyšší koncentrace s výjimkou PAHs se šesti cykly, které se lépe extrahovaly do toluenu, což vyplývá z jejich strukturní podobnosti. Lépe se do něj také extrahovaly PCBs, zde byl rozdíl ovšem jen mírný. Na druhou stranu LMW PAHs vykazovaly výrazně vyšší koncentrace u DCM, pravděpodobně v důsledku jeho nízkého bodu varu a vysoké těkavosti, což minimalizovalo jejich ztráty během zakoncentrování na vakuové rotační odparce. Konkrétní hodnoty koncentrací analytů jsou uvedeny v přílohách (viz. Tabulka 17).



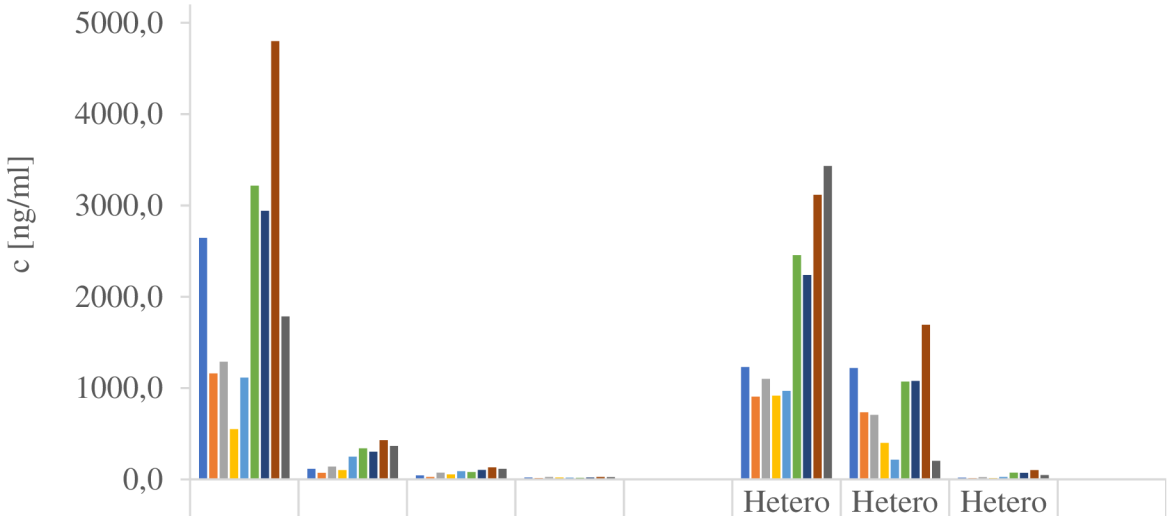
	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Heteroatom dusíku	Heteroatom kyslíku	Heteroatom síry	PCBs
DCM	3195	659	633	373	151	601	564	46	1,9
TOL	1374	576	522	305	195	376	232	23	2,1

Obrázek 15: Koncentrace skupin analytů při porovnáni dichlormethanu a toluenu

5.2.2 Vyhodnocení optimalizace termální desorpce

5.2.2.1 Optimalizace průtoku dusíku a doby extrakce

U termální desorpce se obecně nedosahovalo moc velkých koncentrací HMW PAHs ve výsledných extraktech, což bylo i očekáváno a tato extrakce byla spíše cílena na těkavější LMW PAHs a další látky ze skupiny VOC. Z grafu níže vyplývá, že nejvyšších koncentrací u téměř všech skupin látek bylo dosaženo u extrakce za průtoku dusíku 500 ml/min po dobu 20 min. Výjimku tvořily PAHs s heteroatomem dusíku, které byly pravděpodobně díky tomuto heteroatomu na biouhel sorbovány pevněji, a tak jim prodloužení doby extrakce pomáhalo v jejich desorpci pravděpodobně v důsledku lepšího prohřátí vzorku. U ostatních látek ovšem docházelo při delší době extrakce již k poklesu koncentrací, pravděpodobně v důsledku ztrát ve formě vytěkání z promývací lahve kvůli probublávání dusíkem.

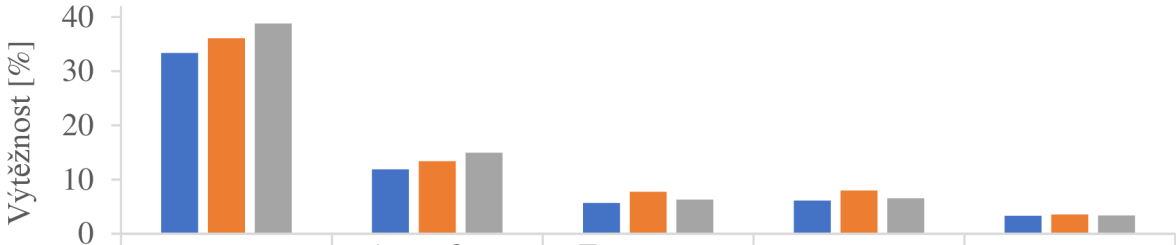


	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
100 ml/min 10 min	2644	115	43	21	4,0	1231	1219	18	0,6
100 ml/min 20 min	1159	71	25	15	2,6	906	735	12	0,6
100 ml/min 30 min	1289	140	72	26	5,3	1101	706	23	0,6
300 ml/min 10 min	551	102	54	20	3,3	917	399	13	0,6
300 ml/min 20 min	1115	250	89	18	3,6	969	216	25	1,3
300 ml/min 30 min	3216	341	82	16	2,6	2456	1071	72	1,5
500 ml/min 10 min	2940	304	104	20	3,3	2237	1077	71	1,2
500 ml/min 20 min	4799	429	133	25	3,2	3115	1693	103	0,6
500 ml/min 30 min	1784	367	116	24	3,2	3432	204	45	1,3

Obrázek 16: Koncentrace skupin látek při optimalizaci termální desorpce

5.2.2.2 *Optimalizace použité teploty*

Po zjištění optimální kombinace průtoku dusíku a extrakční doby byl s touto kombinací parametrů sledován vliv extrakční teploty na koncentraci vyextrahovaných analytů. Zde již byla sledována i výtěžnost vnitřních standardů, která byla obecně dost malá a nepřesáhla 40 %. Nejvyšší byla u Naftalenu, což se také dalo očekávat, jelikož se jedná o nejtěkavější a sublimující PAH.



	Naftalen-D8	Acenaften-D10	Fenantren-D10	Chrysen-D12	Perylen-D12
300 °C	33	12	5,7	6,1	3,3
400 °C	36	13	7,7	7,9	3,5
500 °C	39	15	6,3	6,5	3,3

Obrázek 17: Výtěžnosti vnitřních standardů při optimalizaci teploty termální desorpce

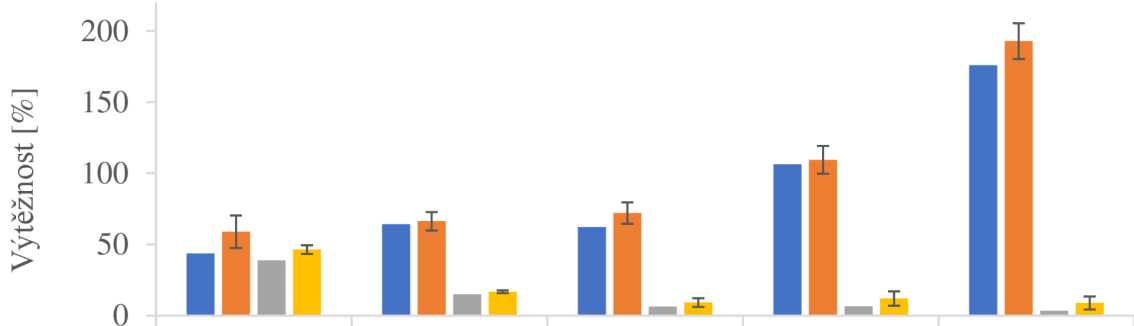
Na konkrétní koncentrace skupin analytů měla rostoucí teplota velmi pozitivní vliv a docházelo k jejich výraznému nárůstu, zvláště u PAHs se dvěma cykly. Zde ovšem vyvstávala otázka, jestli při tak vysokých teplotách nedocházelo k jejich tvorbě z ne úplně zpyrolyzovaného organického materiálu v biouhlu. Tato domněnka byla ovšem vyvrácena, protože vzorky biouhlu pocházely z vysokoteplotní pyrolýzy, a tak se tyto koncentrace v něm pravděpodobně opravdu vyskytovaly. Konkrétní koncentrace jsou uvedeny v přílohách (viz. Tabulka 19). Ke tvorbě lehkých PAHs by ale téměř jistě docházelo při termální desorpci z půdy, díky pyrolýze humusu, a tak byla pro termální desorpci z půdy použita teplota 300 °C, při které je pravděpodobnost tohoto děje již o něco menší.

	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
300 °C	4919	432	128	16	5,0	3005	1695	94	<LOQ
400 °C	20003	1241	267	52	11	5267	4543	178	<LOQ
500 °C	43356	1867	340	65	13	6447	9110	376	<LOQ

Obrázek 18: Koncentrace skupin analytů při optimalizaci teploty termální desorpce

5.2.3 Opakované nejlepší extrakce PSE a termální desorpce

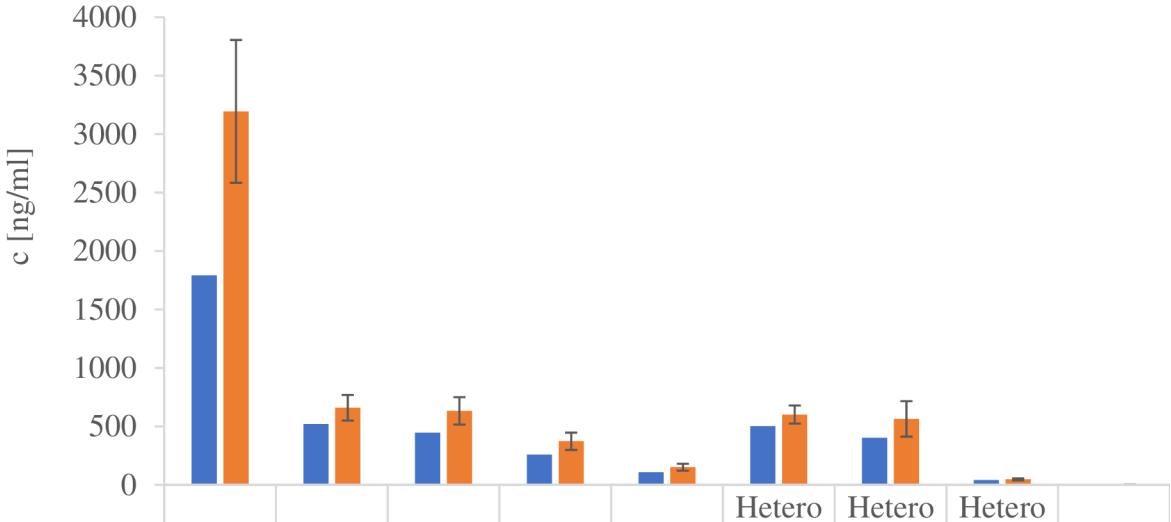
Pro potvrzení správnosti výše zmíněných výsledků byly tyto extrakce ještě třikrát zopakovány, jejich výsledky zprůměrovány a vypočítána směrodatná odchylka. Jak lze vidět na následujících grafech jsou tyto dva typy extrakce navzájem velmi odlišné a obě cílí na jiné skupiny látek. Co se výtěžnosti vnitřních standardů a účinnosti extrakce týče, tak u opakované PSE extrakce došlo k mírnému zvýšení v průměru o 9,5 % u všech vnitřních standardů, ale nedocházelo k velkým výkyvům, a tak byla správnost výsledků z optimalizace potvrzena. U opakované extrakce pomocí termální desorpce tomu bylo také tak, ovšem tato extrakce je o dost méně účinná a výtěžnosti srovnatelné s PSE bylo dosaženo jen u těkavého Naftalenu. Z toho vyplývá, že tato extrakční technika není úplně vhodnou pro kvantitativní stanovení skupiny látek analyzované v této diplomové práci.



	Naftalen-D8	Acenaften-D10	Fenantren-D10	Chrysen-D12	Perylen-D12
PSE opt.	44	64	62	106	176
PSE opak.	59	66	72	109	193
TERM opt.	39	15	6,3	6,5	3,3
TERM opak.	46	17	9,2	12	8,9

Obrázek 19: Výtěžnosti vnitřních standardů u opakovaných optimálních extrakcí

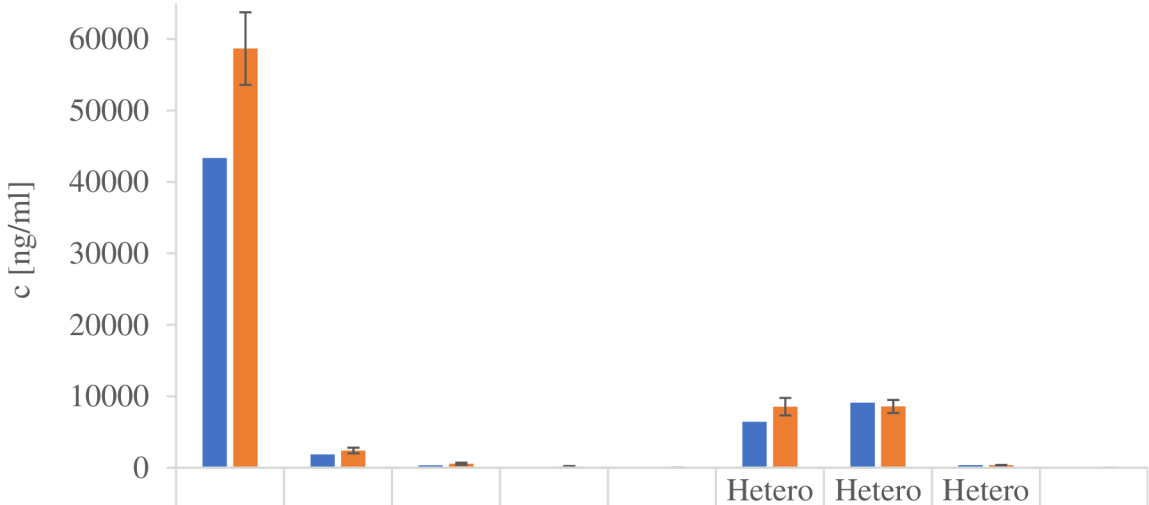
Při podrobnějším rozboru koncentrací skupin analytů u opakované PSE extrakce (viz. Obrázek 20) bylo zjištěno, že jejich jednotlivé koncentrace byly v těchto opakovaných extraktech biouhlu v průměru o 30 % vyšší než při původní extrakci během samotné optimalizace. Výjimku tvořily skupiny sloučenin s heteroatomem dusíku a síry, jejichž koncentrace vzrostly v průměru o 15 %. Toto zvýšení koncentrací by mohlo být způsobeno přenosem analytů mezi extrakcemi díky nedokonalému vypláchnutí extraktoru. To ale bylo vyvráceno analýzou extrakčních blanků, ve kterých byly tyto analyty pouze v malých koncentracích. Další příčinnou by mohl být jiný biouhel, ten ale byl při těchto opakovaných extrakcích stejný jako při optimalizaci samotné. Také manipulace s extraktem (zakoncentrování a filtrace) byly provedeny stejně a za stejných podmínek jako u předchozích vzorků během optimalizace. Z toho vyplývá, že pravděpodobnou příčinnou těchto vyšších vyextrahovaných koncentrací je nehomogenní distribuce sorbovaných analytů na částicích biouhlu a navažované vzorky pro opakované extrakce jednoduše obsahovaly mírně vyšší koncentrace sorbovaných kontaminantů než části vzorků navažované v optimalizaci.



	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
PSE opt.	1792	521	447	257	107	503	403	40	1,2
PSE opak.	3195	659	633	373	151	601	564	46	1,9

Obrázek 20: Koncentrace skupin analytů v opakovaných optimálních PSE extrakcích

Toto navýšení koncentrací se projevilo i při extrakci pomocí termální desorpce, což potvrzuje výše zmíněnou teorii o nerovnoměrné distribuci analytů na částicích biouhlu. To ovšem úplně neovlivňuje správnost optimalizace, protože nedocházelo k velkým výkyvům v těchto opakovaných extrakcích a navýšení vyextrahovaných koncentrací analytů spíše podporuje správnost výběru extrakčních podmínek během optimalizace. Konkrétní koncentrace v těchto opakovaných extraktech jsou opět uvedeny přílohách (viz. Tabulka 20).



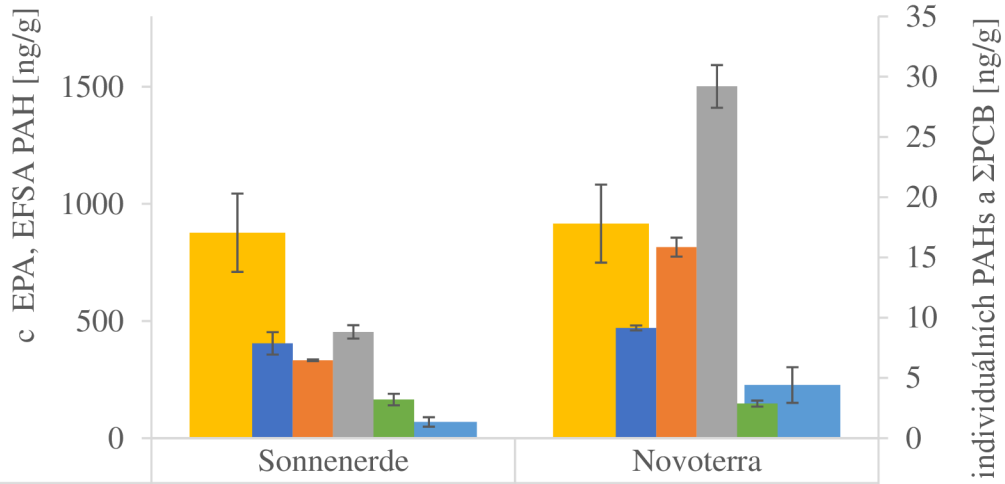
	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
TERM opt.	43356	1867	340	65	13	6447	9110	376	<LOQ
TERM opak.	58661	2418	562	173	36	8550	8578	378	<LOQ

Obrázek 21: Koncentrace skupin analytů v opakovaných optimálních termálních desorpcích

5.3 Vyhodnocení kvantifikace extraktů z reálných vzorků

5.3.1 Porovnání extraktů z původních biouhlů Sonnenerde a Novoterra

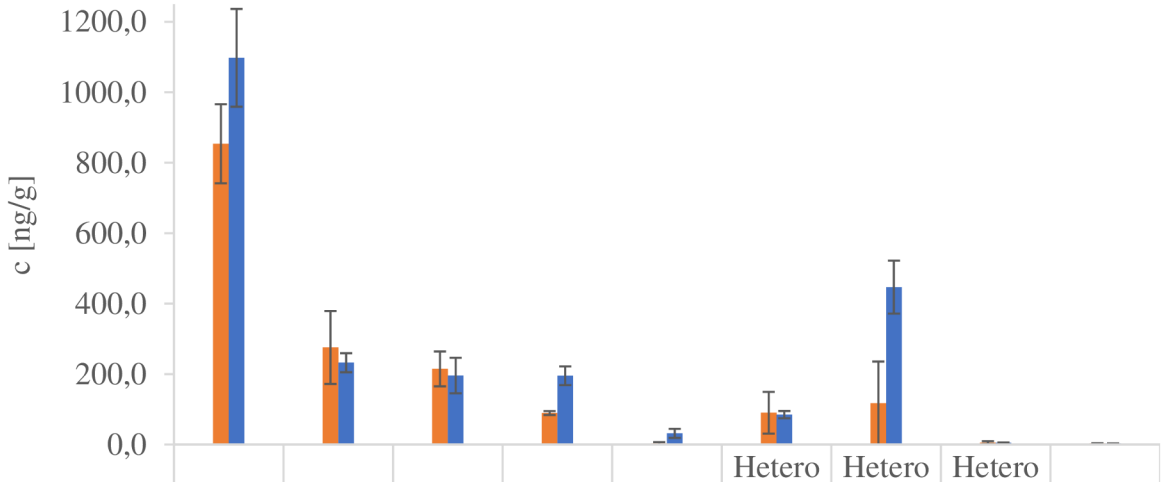
Naměřené koncentrace v extraktech z původních biouhlů byly interpretovány podle EBC norem (viz. bod 2.3.8) pomocí sumy 16 EPA PAHs a 8 EFSA PAHs. Dále byla také stanovena suma 7 indikátorových PCB a individuální koncentrace Benzo[e]pyrenu a Benzo[k]fluorantenu. Ten byl náhradou za EBC normami určený Benzo[j]fluoranten, protože je k němu strukturně nejblíže a byl obsažen ve směsném standardu. Dále je zde individuálně také uveden Benzo[a]pyren jako karcinogen 1. třídy a také z toho důvodu, že podle dřívějších, ale při vypracovávání této diplomové práce stále platných EBC směrnic byl také stanovován individuálně. Po vztažení těchto koncentrací na původní navážku bylo zjištěno, že oba biouhly splňovaly i ty nejpřísnější limity každé EBC třídy použití biouhlu tykající se organických kontaminantů. Obsahovaly přibližně stejné množství skupiny 16 EPA PAHs, což už ale neplatilo neplatilo u skupiny 8 EFSA PAHs, u které byla suma koncentrací těchto látek vyšší u biouhlu Novoterra, stejně tak jako koncentrace Benzo[e] a [a] pyrenu a Benzo[k]fluorantenu, z čehož by šlo vyvodit, že tento biouhel obsahoval vyšší množství těžších PAHs, jelikož i skupina 8 EFSA PAHs obsahuje jen sloučeniny se 4 až 6 cykly (viz. bod 2.3.8). Pro zjednodušení byl jako individuální PAH v grafech dále sledován pouze Benzo[e]pyren, jelikož není obsažen ani v jedné skupině indikátorových PAHs a je karcinogenem 3. třídy. Navíc je nejnovější látkou jejíž koncentrace se sledují individuálně podle směrnic EBC do kterých byl přidán v lednu 2022.



	Sonnenerde	Novoterra
Σ16 EPA PAH	877	916
Σ8 EFSA PAH	69	227
Benzo[e]pyren	7,9	9,2
Benzo[a]pyren	6,5	16
Benzo[k]fluoranten	8,8	29
Σ7 PCB	3,2	2,9

Obrázek 22: Koncentrace indikátorových skupin a individuálních PAHs podle EBC

Domněnka o vyšším obsahu HMW PAHs v biouhlu Novoterra pak byla částečně potvrzena i pomocí stanovení všech analytů rozdělených podle počtu cyklů v molekule. Biouhel Novoterra skutečně obsahoval vyšší koncentrace PAHs s 5 a 6 cykly, ovšem PAHs se 4 cykly byly obsaženy ve vyšší míře u biouhlu Sonnenerde a stejně tak i PAHs se 3 cykly a s heteroatomem dusíku v molekule. Toto navýšení bylo způsobeno především vyššími koncentracemi fluorantenu (4 cykly) a antracenu s fenantrenem (3 cykly). Také bylo pomocí tohoto rozdělení a stanovení dalších analytů zjištěno, že biouhel Novoterra obsahuje výrazně vyšší množství PAHs se dvěma cykly a sloučenin s heteroatomem kyslíku. Konkrétní koncentrace analytů jsou uvedeny na konci práce v přílohách (viz. Tabulka 21).



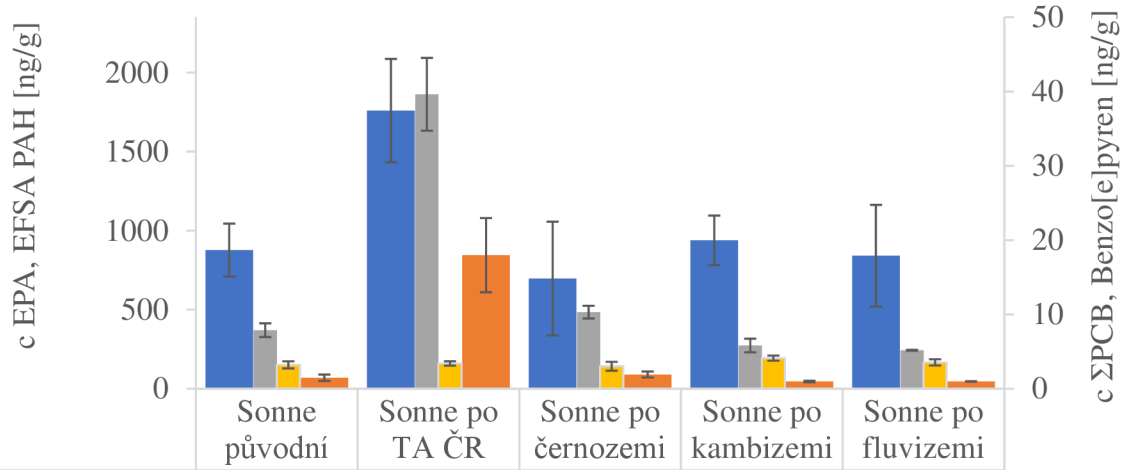
	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
Sonnenerde	854	276	215	90	2,9	90	117	5,6	3,2
Novoterra	1098	232	196	195	32	85	447	4,9	2,9

Obrázek 23: Koncentrace skupin všech stanovovaných analytů v původních biouhlech

5.3.2 Porovnání biouhlů před a po interakci s půdou

5.3.2.1 Biouhel Sonnenerde

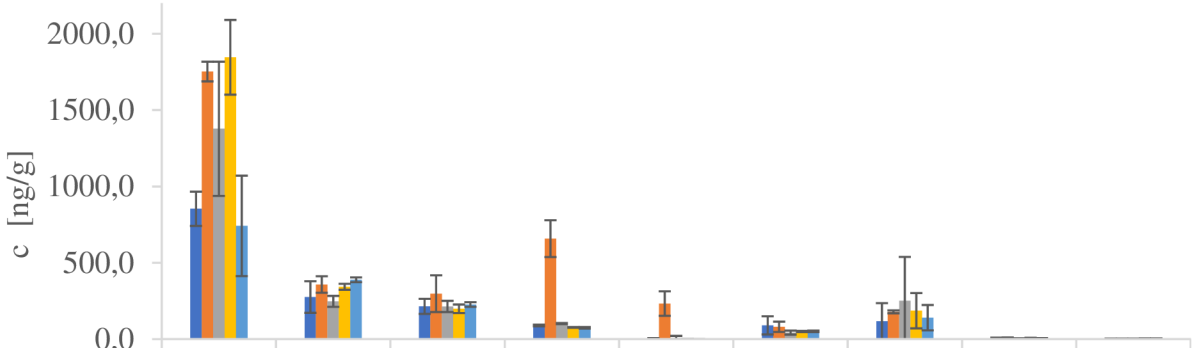
Změny koncentrací analytů v biouhlu byly silně závislé na typu půdy, do které byly přidávány. Výrazné zvýšení koncentrací indikátorových skupin bylo pozorováno pouze u půdy TA ČR, u které došlo k jejích velkému navýšení, pravděpodobně v důsledku nižšího obsahu organické složky v této půdě, což podporovalo sorpci kontaminantů na biouhel. U ostatních půd se koncentrace skupiny 16 EPA PAH příliš neměnila, docházelo ovšem k poklesu u skupiny 8 EFSA PAH, která zahrnuje těžké PAHs. Koncentrace Benzo[e]pyrenu v tomto biouhlu se po interakci s půdou snižovaly jen mírně, nebo se například v černozemi, stejně jako u půdy TA ČR zvyšovaly. U skupiny PCBs nedocházelo k výrazným změnám koncentrací ani u jedné z půd.



	Sonne původní	Sonne po TA ČR	Sonne po černozemi	Sonne po kambizemi	Sonne po fluvizemi
Σ16 EPA PAH	877	1760	697	939	841
Σ8 EFSA PAH	69	845	90	45	46
Benzo[e]pyren	7,9	40	10	5,8	5,2
Σ7 PCB	3,2	3,4	3,0	4,1	3,5

Obrázek 24: Koncentrace indikátorových skupin v biouhlu Sonnnenerde před a po interakci s půdou

Při zahrnutí všech zbývajících analytů do sum koncentrací bylo zjištěno, že k navýšení koncentrací PAHs docházelo u téměř všech skupin analytů po interakci s téměř každou půdou což naznačuje obecnou akumulaci kontaminantů do biouhlu. Na tomto grafu níže je také výraznější vzrůst koncentrací PAHs v biouhlu po interakci s půdou TA ČR, zvláště u lehkých PAHs se dvěma cykly, ale i u těžkých PAHs s pěti a šesti cykly. Tento nárůst koncentrace v biouhlu může být způsoben typem této půdy, jelikož se jednalo o písčitou, aridní půdu, které neobsahuje moc organických látek na které by PAHs mohly být sorbovány a tak přednostně přecházely do biouhlu a sorbovaly se na něj. U ostatních půd koncentrace PAHs se dvěma cykly také výrazně vzrůstala, s výjimkou fluvizemě, u které ale byla pro tuto skupinu velká směrodatná odchylka, takže vzrůstat mohly také a pouze se jich vyextrahovalo menší množství, nebo došlo k významnější ztrátě těchto analytů při manipulaci s extraktem. PAHs se třemi cykly pak také vzrůstaly, ale s výjimkou černozemě. U těžkých PAHs se 4 – 6 cykly pak docházelo po interakci s půdami spíše k poklesu (u kambizemě a fluvizemě sloučeniny s 6ti cykly klesly i pod LOQ). Výjimku ovšem tvořila černozem, u které koncentrace PAHs s 5 a 6 ti cykly mírně vzrostla. Koncentrace sloučenin s heteroatomem dusíku klesla po interakcemi se všemi půdami, ale u těch s heteroatomem kyslíku na druhou stranu u všech vzrostla, což může naznačovat mikrobiální aktivitu metabolizující PAH sloučeniny. Koncentrace sloučenin s heteroatomem síry a PCBs se výrazně neměnily, jen u koncentrace PCBs po interakci s kambizemí a fluvizemí došlo k velmi mírnému zvýšení.

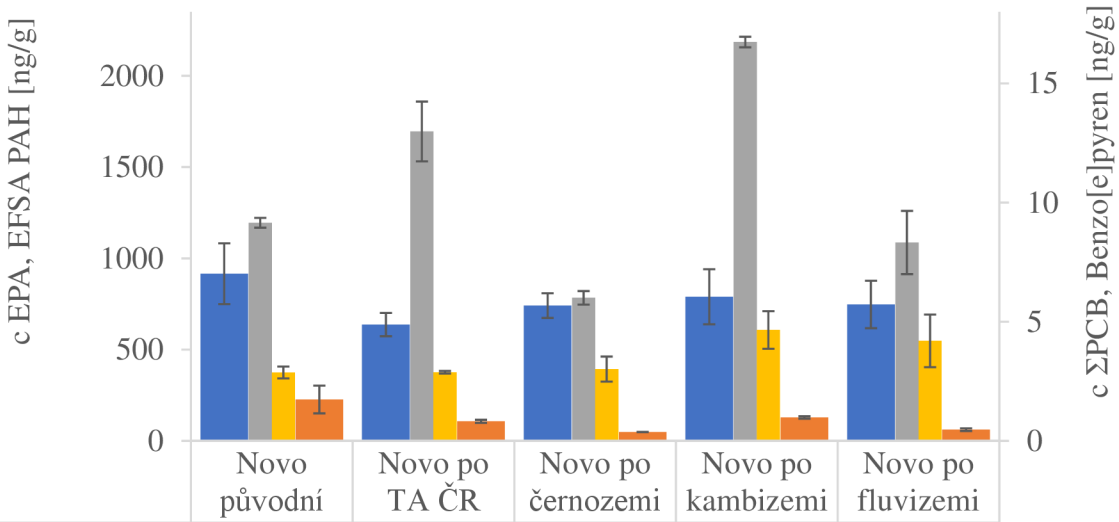


	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
Sonne původní	854	276	215	90	2,9	90	117	5,6	3,2
Po TA ČR	1753	358	298	658	233	81	178	8,1	3,4
Po Černozemi	1378	247	214	102	8,7	43	252	3,8	3,1
Po Kambizemi	1846	343	199	77	<LOQ	51	186	7,6	4,1
Po Fluvizemi	742	389	227	74	<LOQ	51	140	5,7	3,5

Obrázek 25: Koncentrace všech analytů podle cyklů v biouhlu Sonnenerde před a po půdní interakci

5.3.2.2 Biouhel Novoterra

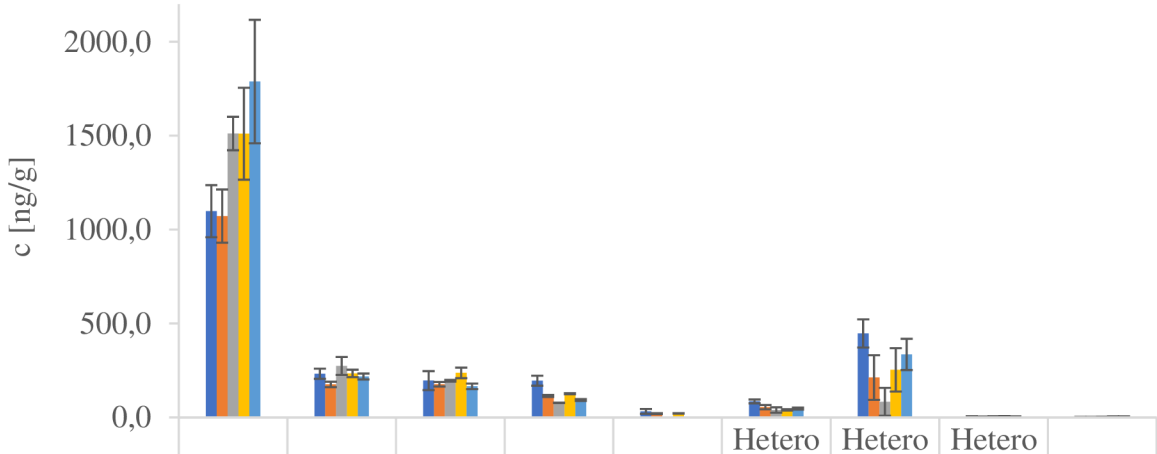
Původní koncentrace indikátorových skupin analytů v tomto biouhlu byla vyšší než u biouhlu Sonnenerde. Z tohoto důvodu pak také docházelo u indikátorových skupin spíše ke snížení koncentrací po interakcemi s půdami. Výjimkou byla koncentrace Benzo[e]pyrenu, který vzrůstal po interakci s TA ČR a kambizemí a také skupiny PCBs po interakci s kambizemí a fluvizemí, kdy docházelo stejně jako u předchozího biouhlu k jejímu nárůstu.



	Novo původní	Novo po TA ČR	Novo po černozemi	Novo po kambizemi	Novo po fluvizemi
Σ16 EPA PAH	916	637	741	789	747
Σ8 EFSA PAH	227	107	49	128	62
Benzo[e]pyren	9,2	13	6,0	17	8,3
Σ7 PCB	2,9	2,9	3,0	4,7	4,2

Obrázek 26: Koncentrace indikátorových skupin v biouhlu Novoterra před a po interakci s půdou

Ovšem po přidání všech ostatních stanovovaných analytů do sum bylo zjištěno, že pouze k poklesům koncentrací nedocházelo a naopak koncentrace analytů se dvěma cykly vzrůstala po interakci se všemi půdami, výjimkou byla pouze půda TA ČR, u které oproti biouhlu Sonnenerde došlo k mírnému poklesu koncentrací u všech skupin analytů. Po interakci s černozemí pak ze zbylých skupin analytů vzrostla jen koncentrace PAHs se třemi cykly a u ostatních skupin koncentrace v biouhlu klesaly nebo se výrazně neměnily. U kambizemě byl trend stejný, až na to že významně vzrůstala skupina PAHs se 4 cykly místo těch se 3 cykly. Po interakci s fluvizemí významně klesla koncentrace všech zbylých skupin analytů, kromě skupiny PCBs, která mírně vzrůstala po interakci s kambizemí i fluvizemí.



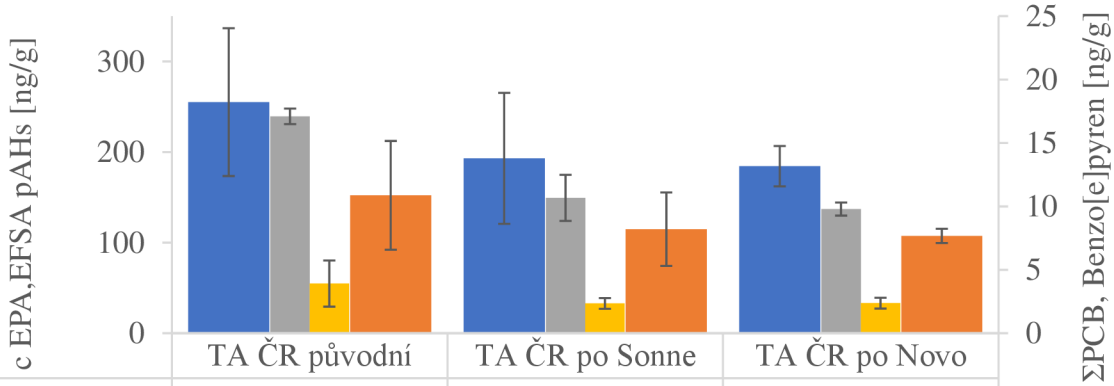
	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
Novo původní	1098	232	196	195	31,9	85	447	4,9	2,9
Po TA ČR	1072	176	177	114	19,8	54	212	3,2	2,9
Po Černozemi	1511	274	195	78	<LOQ	40	83	3,7	3,0
Po Kambizemi	1510	234	237	126	21,1	40	253	6,1	4,7
Po Fluvizemi	1788	218	165	92	<LOQ	47	335	4,9	4,2

Obrázek 27: Koncentrace všech analytů podle cyklů v biouhlu Novoterra před a po půdní interakci

5.3.3 Stanovení míry kontaminace půdy z biouhlu

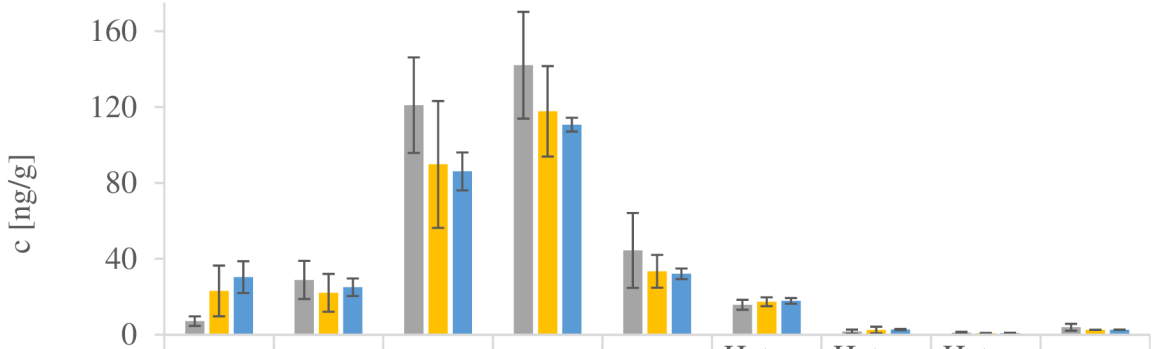
5.3.3.1 TA ČR půda

U této půdy bylo zjištěno, že docházelo k poklesu všech indikátorových skupin, což potvrdila i podrobnější analýza koncentrací všech analytů, kde byly výjimkou pouze lehké PAHs se dvěma cykly, jejichž koncentrace po interakci s oběma biouhly narůstaly. Mírně také narůstaly koncentrace PAHs s heteroatomem dusíku a kyslíku, což by opět mohlo znamenat mikrobiální metabolizaci. Výsledkem tedy je, že biouhel tuto půdu spíše čistí a akumuluje kontaminanty do sebe, nebo podporuje jejich mikrobiální degradaci, či přechod do rostlin, přičemž výraznější tento efekt byl u biouhlu Novoterra.



	TA ČR původní	TA ČR po Sonne	TA ČR po Novo
Σ16 EPA PAH	255	193	184
Σ8 EFSA PAH	152	115	107
Benzo[e]pyren	17	11	9,8
Σ7 PCB	3,9	2,3	2,4

Obrázek 28: Koncentrace indikátorových skupin v půdě TA ČR před a po interakci s biouhlem

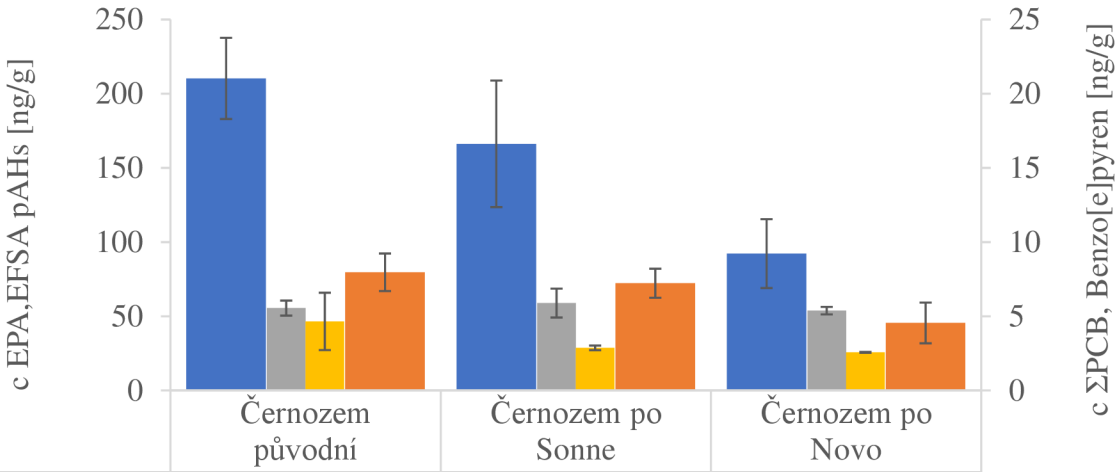


	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
TA ČR původní	7,1	29	121	142	44	16	1,6	1,1	3,9
Ta ČR po Sonne	23	22	90	118	33	17	2,5	0,8	2,6
Ta ČR po Novo	30	25	86	111	32	18	2,8	0,8	2,6

Obrázek 29: Koncentrace všech analytů podle cyklů v půdě TA ČR před a po interakci s biouhlem

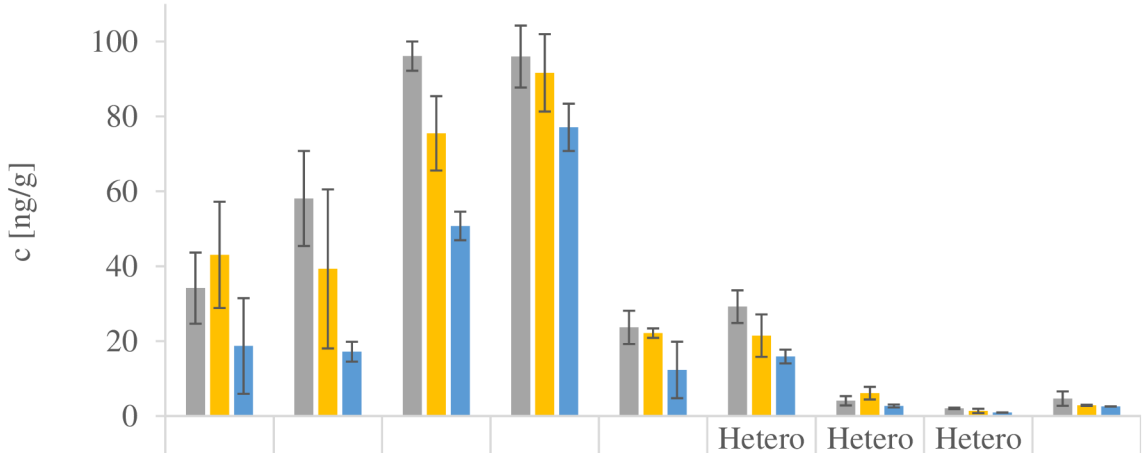
5.3.3.2 *Černozem*

Stejný klesající trend byl pozorován i u černozemě, jak podle indikátorových skupin, tak podle skupin všech analytů. Výjimkou byla pouze černozem po Sonnenerde u které mírně vzrostla koncentrace PAHs se dvěma cykly. Obecně lze ale také říct, že biouhly odstraňovaly kontaminanty z této půdy, přičemž biouhel Novoterra byl v tomto opět efektivnější.



	Černozem původní	Černozem po Sonne	Černozem po Novo
Σ16 EPA PAH	210	166	92
Σ8 EFSA PAH	80	72	45
Benzo[e]pyren	5,6	5,9	5,4
Σ7 PCB	4,7	2,9	2,6

Obrázek 30: Koncentrace indikátorových skupin v černozemi před a po interakci s biouhlem

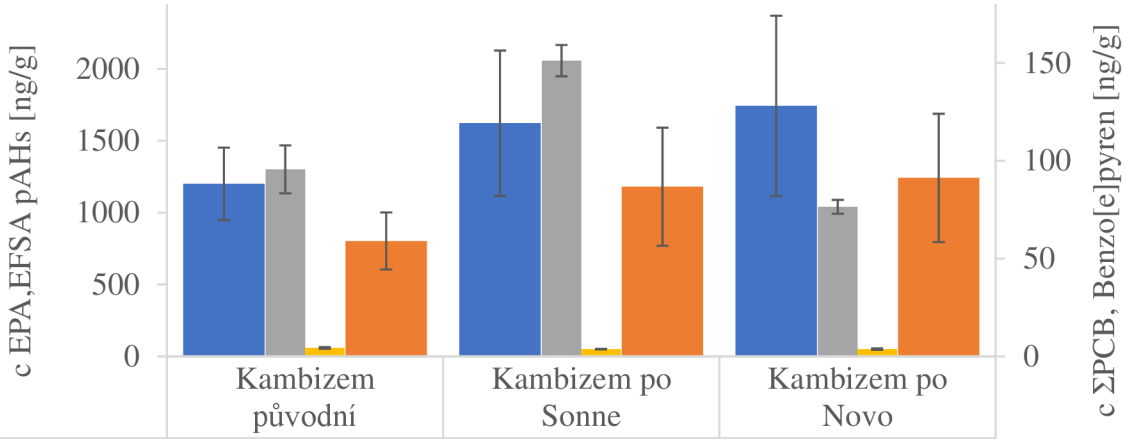


	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
Černozem původní	34	58	96	96	24	29	4,1	2,0	4,7
Černozem po Sonne	43	39	75	92	22	21	6,1	1,4	2,9
Černozem po Novo	19	17	51	77	12	16	2,7	0,9	2,6

Obrázek 31: Koncentrace všech analytů podle cyklů v černozemi před a po interakci s biouhlem

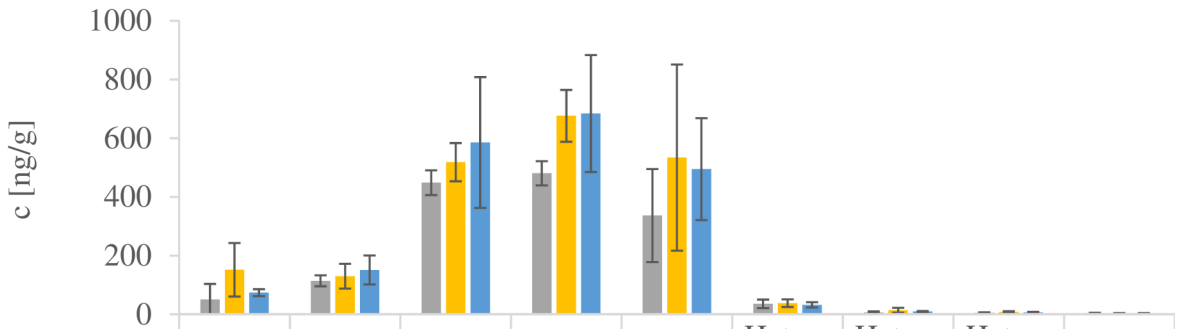
5.3.3.3 *Kambizem*

U kambizemě bylo již trendem spíše narůstání koncentrací kontaminantů v půdě. A to jak podle indikátorových skupin, tak podle skupin všech analytů. To mohlo souviset také s poměrně vysokou koncentrací kontaminantů v původní půdě, jednalo se totiž o nejkontaminovanější půdu ze všech analyzovaných, což mohlo napomáhat přirozené desorpci kontaminantů z biouhlu. To ovšem neplatilo pro skupiny PCBs, u které docházelo k mírnému snížení koncentrace. U této půdy ovšem byly také poměrně velké směrodatné odchylky, a tak se mohlo také jednat o chybu měření způsobenou pravděpodobně nehomogenitou půdního materiálu.



	Kambizem původní	Kambizem po Sonne	Kambizem po Novo
Σ16 EPA PAH	1200	1622	1742
Σ8 EFSA PAH	803	1180	1242
Benzo[e]pyren	96	151	76
Σ7 PCB	4,4	3,7	3,7

Obrázek 32: Koncentrace indikátorových skupin v kambizemi před a po interakci s biouhlem

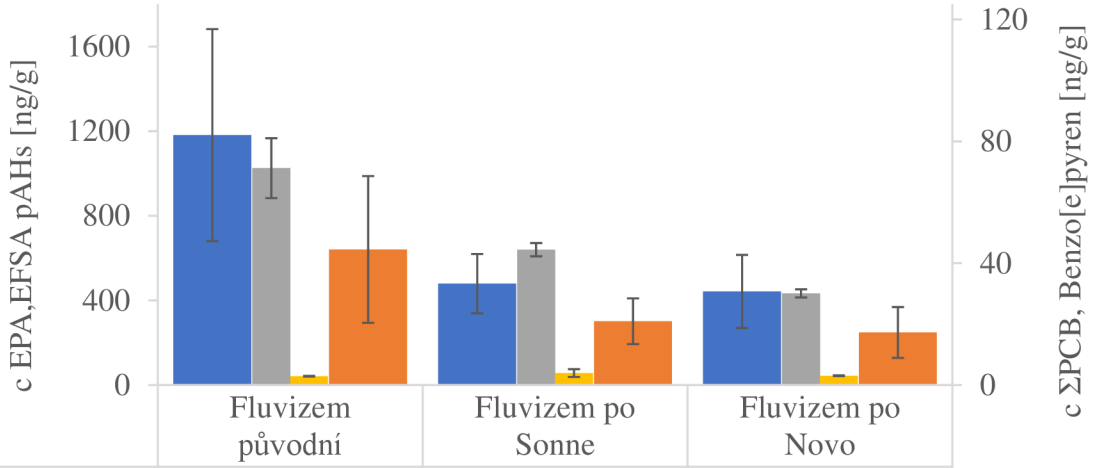


	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
Kambizem původní	51	114	448	480	336	36	6,2	5,5	4,4
Kambizem po Sonne	152	130	518	676	534	38	14	7,8	3,7
Kambizem po Novo	74	151	585	684	495	32	9,5	6,5	3,7

Obrázek 33: Koncentrace všech analytů podle cyklů v kambizemi před a po interakci s biouhlem

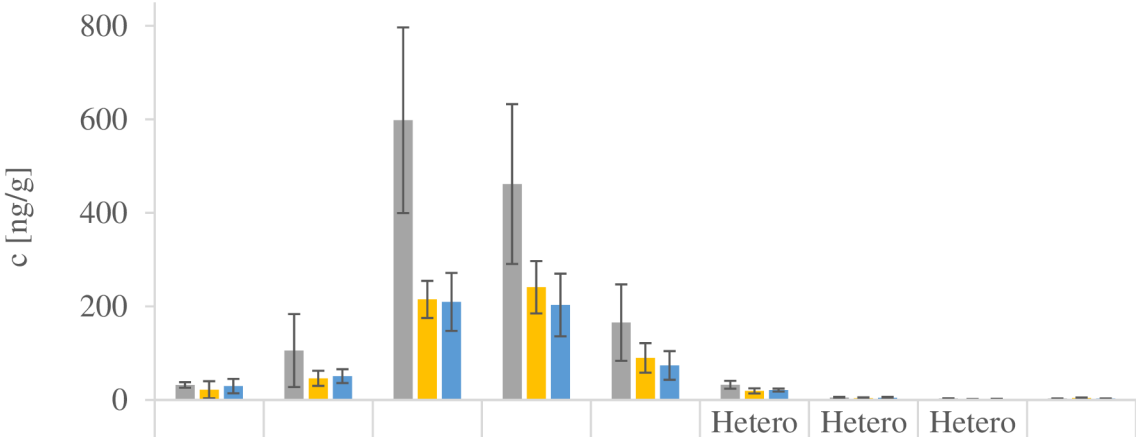
5.3.3.4 *Fluvizem*

Tato půda již opět vykazovala klesající trend koncentrací analytů po přidání biouhlu stejně jako u TA ČR a černozemě. Zde ovšem byly účinnosti akumulace kontaminantů z půdy do biouhlu srovnatelné u obou analyzovaných biouhlů, a docházelo k výraznému poklesu koncentrací HMW PAHs, což bylo pravděpodobně způsobeno nižším obsahem organické složky v této půdě a tak se tyto kontaminanty z půdy přednostně sorbovaly na biouhel.



	Fluvizem původní	Fluvizem po Sonne	Fluvizem po Novo
Σ16 EPA PAH	1181	479	443
Σ8 EFSA PAH	641	302	249
Benzo[e]pyren	71	44	30
Σ7 PCB	2,9	3,9	3,1

Obrázek 34: Koncentrace indikátorových skupin ve fluvizemi před a po interakci s biouhlem



	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
Fluvizem původní	32	106	598	462	165	33	4,9	3,0	2,9
Fluvizem po Sonne	22	46	215	241	90	19	3,8	1,8	3,9
Fluvizem po Novo	30	51	210	203	74	21	4,6	1,8	3,1

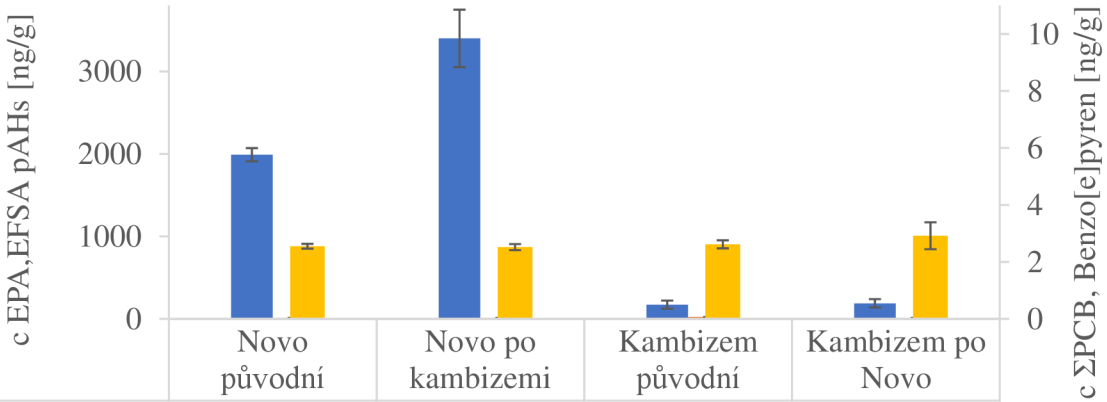
Obrázek 35: Koncentrace všech analytů podle cyklů ve fluvizemi před a po interakci s biouhlem

5.3.4 Termální desorpce nejvíce kontaminované půdy a příslušného biouhlu

V rozborech koncentrací uvedených výše bylo zjištěno, že nejkontaminovanější původní půdou byla kambizem a nejkontaminovanějším biouhlem Novoterra. To bylo zjištěno jak podle indikátorových skupin a individuální koncentrace Benzo[e]pyrenu, tak i podle rozboru všech látek rozdělených podle cyklů. Z tohoto důvodu byla provedena také extrakce pomocí termální desorpce u vzorků této půdy i biouhlu před i po vzájemné interakci.

5.3.4.1 Stanovení sumy 16 EPA PAH, 8 EFSA PAH, 7 PCB a Benzo[e]pyrenu

Tato analýza pomocí indikátorových skupin nebyla u tohoto extraktu příliš efektivní, protože pomocí termální desorpce nebyly získány jen malé kvantifikovatelné koncentrace HMW PAHs, což lze vidět na koncentraci jak Benzo[e]pyrenu, tak na sumě koncentrací 8 EFSA PAHs a skupina 16 EPA PAHs je nejpravděpodobněji tvořena především vysokou koncentrací Naftalenu a dalších LMW PAHs. Lze z těchto skupin ovšem také vyčíst nárůst koncentrací PAHs v biouhlu po interakci s kambizemí, tak i mírný nárůst koncentrací skupiny 16 EPA PAHs v půdě po interakci s biouhlem.

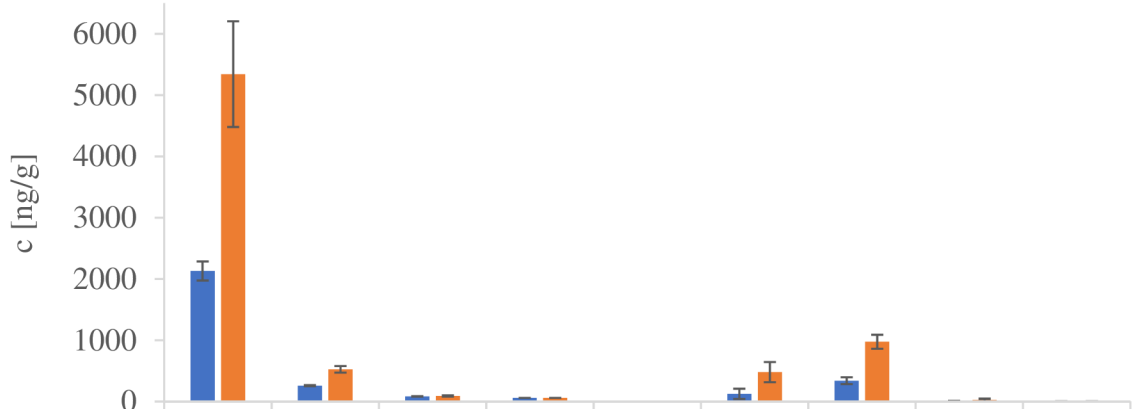


	Novo původní	Novo po kambizemi	Kambizem původní	Kambizem po Novo
Σ16 EPA PAH	1990	3401	173	189
Σ8 EFSA PAH	12	13	23	12
Benzo[e]pyren	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Σ7 PCB	2,5	2,5	2,6	2,9

Obrázek 36: Koncentrace indikátorových skupin ve vzorcích použitých při termální desorpci

5.3.4.2 Stanovení sum skupin analytů podle cyklů

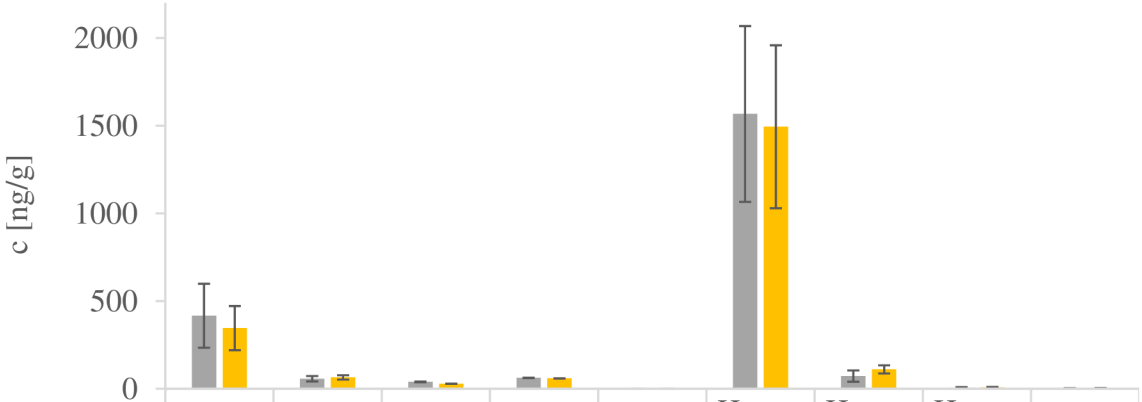
Po určení koncentrací všech analytů rozdělených podle cyklů bylo zjištěno, že většinu této sumy opravdu tvoří LMW PAHs se dvěma cykly a v menší míře pak PAHs se třemi cykly a s heteroatomem dusíku a kyslíku. Byl zde také patrný nárůst koncentrací po interakci s půdou u všech skupin s výjimkou skupiny PCB, kde koncentrace zůstávaly stejné



	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
Novo Původní	2130	259	84	59	<LOQ	125	340	7,3	2,5
Novo po Kambizemi	5343	525	90	59	<LOQ	480	975	26	2,5

Obrázek 37: Koncentrace všech analytů podle cyklů v biouhlu Novoterra při termální desorpci

U termální desorpce z půdy byly koncentrace sloučenin s heteroatomem dusíku mnohem vyšší, než u biouhlu a byly také nejvyšší ze všech v tomto grafu, druhou nejvýraznější skupinou byly LMW PAHs se dvěma cykly a pak sloučeniny s heteroatomem kyslíku. Všechny tyto látky byly v extraktech očekávány, protože se jedná o poměrně těkavé sloučeniny. U těchto extraktů lze také oproti PSE extraktům pozorovat mírný pokles koncentrací kontaminantů po interakci půdy s biouhlem.



	2 cykly	3 cykly	4 cykly	5 cyklů	6 cyklů	Hetero atom dusíku	Hetero atom kyslíku	Hetero atom síry	PCBs
Kambizem původní	416	57	39	61	<LOQ	1567	72	6,1	2,6
Kambizem po Novo	345	64	28	59	<LOQ	1494	110	6,9	2,9

Obrázek 38: Koncentrace všech analytů podle cyklů v kambizemi při termální desorpci

5.3.5 Shrnutí a porovnání výsledků kvantitativní analýzy

V kvantitativní analýze bylo dosaženo poměrně nízkých limitů detekce v rozmezí 0,1 – 3,4 ng/ml extraktu díky přesnosti namíchaných koncentrací v řadě kalibračních roztoků, což poskytlo dobrou lineární odezvu signálu a malé odchylky naměřených hodnot od kalibrační přímky. K nízkým limitům detekce přispěly také velmi malé plochy píků jednotlivých analytů v blank vzorcích a zanedbatelný paměťový efekt přístroje. Pro srovnání například ve studii [55] od Puspa a kolektivu, ve které bylo také měřeno na plynovém chromatografu ve spojení s trojitým kvadrupólovým analyzátorem bylo pro PAHs dosaženo limitů detekce v rozmezí 0,02 – 0,65 ng/ml.

Dále bylo pomocí kvantitativní analýzy zjištěno, že oba analyzované biouhly splňovaly i ty nejpřísnější EBC limity týkající se organických kontaminantů pro všechny třídy kvality. Toto zjištění je potvrzeno certifikátem EBC Agro, kterým oba tyto biouhly disponovaly.

V kvantitativní analýze byl pro biouhel Sonnenerde po interakci s třemi ze čtyř půd pozorován buď pokles nebo nevýrazná změna koncentrací indikátorových skupin. Výjimkou byla interakce s písčitou půdou TA ČR, po které se koncentrace indikátorových skupin výrazně zvedly v důsledku nízkého obsahu organické složky v půdě (viz. bod 5.3.2.1). Podobný trend indikátorových skupin byl pozorován i u biouhlu Novoterra, ovšem už bez výjimky po interakci s půdou TA ČR. Toto snižování koncentrací by naznačovalo uvolňování kontaminantů z biouhlu do půdy, což ovšem bylo vyvráceno analýzou půdních extraktů před a po interakci. Koncentrace PCBs se v biouhlu po interakci s půdami buď téměř neměnily, nebo mírně vzrůstaly, což naznačovalo jejich sorpci z půdy na biouhel.

U půdních extraktů byl zjištěn klesající trend koncentrací kontaminantů u tří ze čtyř půd. Výjimku tvořila kambizem, u které koncentrace kontaminantů v půdě vzrůstaly. Zde ale pravděpodobně došlo k chybě měření (viz. bod 5.3.3.3), jelikož u termální desorpce této nejkontaminovanější půdy již byly i přes její menší účinnost pro všechny analyty patrné mírné poklesy koncentrací stanovitelných touto extrakční metodou.

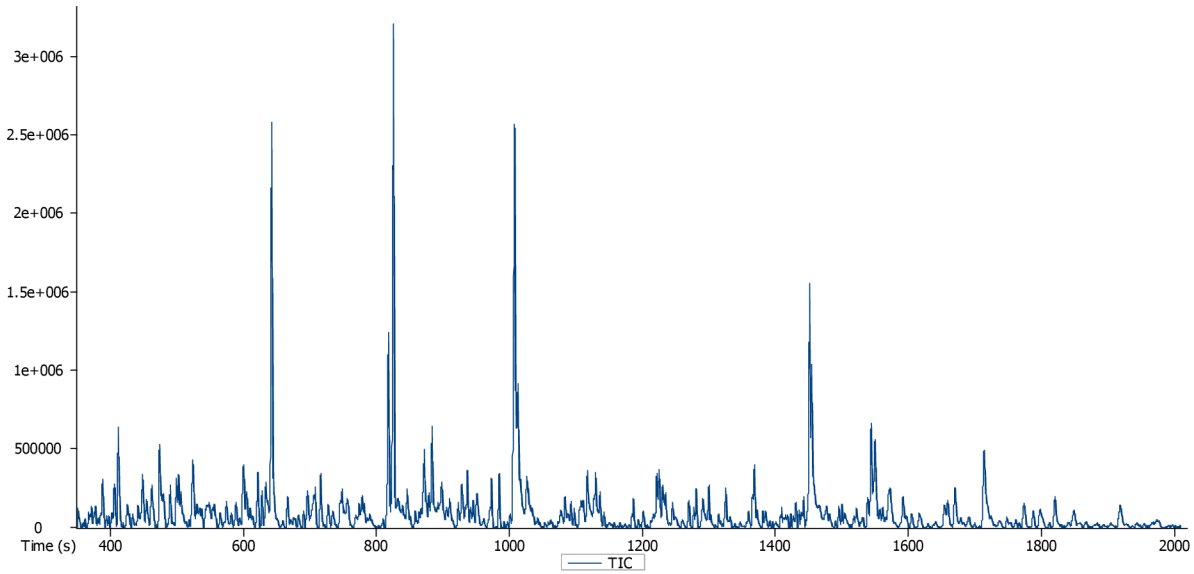
Tyto klesající trendy koncentrací jak u půdy, tak i v menší míře u biouhlu naznačují mikrobiální degradaci těchto kontaminantů, která je přídavkem biouhlu podporována. Podpora degradace PAHs díky přídavku biouhlu byla pozorována také ve studii z roku 2022 od Chaomenga a kolektivu [20], ve které bylo zjištěno, že biouhel může zvyšovat počet mikroorganismů přítomných v půdě tak, že jim poskytuje habitat a zdroj uhlíku. Kromě mikrobiální degradace také mohlo docházet k sorpci PAHs na kořeny rostlin, jak ve své studii [25] zmiňuje Buss a kolektiv. Zde by to konkrétně byly kořeny kukuřice seté pěstované v dlouhodobém experimentu v bakalářské práci Natálie Štorkové (viz. bod 4.5) a pro ověření této hypotézy by je bylo nutno analyzovat.

5.4 Vyhodnocení kvalitativní analýzy

Pomocí měření na GC-TOF bylo v extraktech nalezeno velké množství látek, ovšem brány v potaz byly pouze ty s alespoň 80% shodou hmotnostních spekter s knihovnou neboli se similaritou 800 a výše. Dále bylo nutné od těchto látek odečíst pozadí přístroje, které bylo tvořeno z velkého množství nalezených ftalátů, siloxanů a karbamových kyselin. Po této úpravě, byly naměřené analyty roztřízeny do skupin (viz. Obrázek 41), ale všechny látky stanovené v každém extraktu měřeném touto technikou jsou uvedeny v přílohách (viz. Tabulka 31 až Tabulka 48). Názvy analytů ovšem z důvodu jejich velkého množství nebyly překládány a byly ponechány tak jak je zobrazil vyhodnocovací program.

5.4.1 Nejlepší extrakt z PSE optimalizace

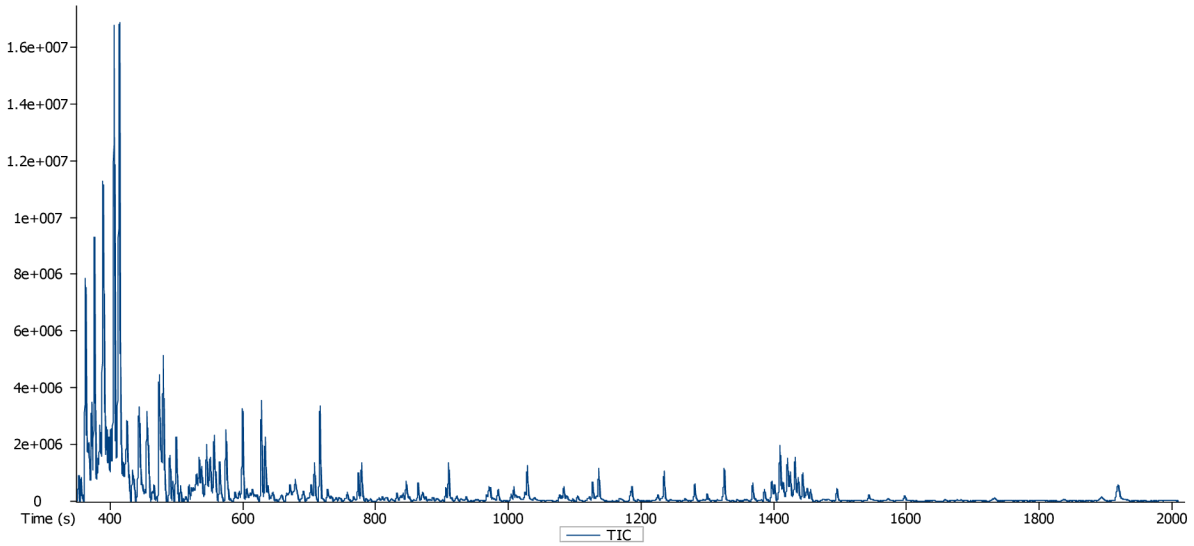
Už jen z chromatografu níže lze předpokládat velké množství látek o různých koncentracích, které ovšem byly z velké části obtížně identifikovatelné, protože zde docházelo ke koelucím, což snižovalo similaritu spekter jednotlivých píků v porovnání s knihovnou, a tak bylo hodně látek na základě předem stanoveného parametru 80% shody spekter nutno vynechat. Koeluce jsou pak částečně vyřešeny použitím dvoudimenzionální chromatografie u analýzy PSE extraktů nejkontaminovanější půdy a biouhlu.



Obrázek 39: 1D TIC chromatogram nejlepšího extraktu z PSE optimalizace

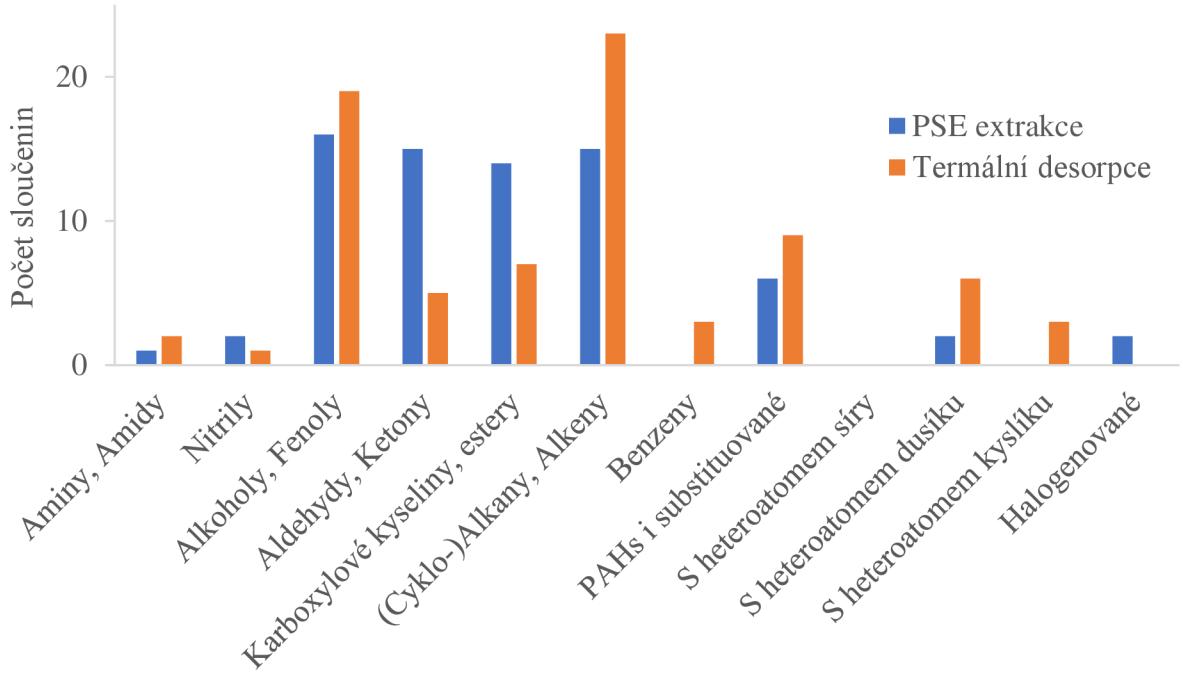
5.4.2 Nejlepší extrakt z optimalizace termální desorpce

Chromatogram extraktu termální desorpce byl značně odlišný od toho předchozího a lze na něm pozorovat velké množství píku krátce po začátku analýzy, což naznačuje těkavou povahu těchto analytů a jejich ne příliš silnou interakci se stacionární fází v koloně. Na začátku analýzy byl také problém s koelucemi, ale později již nebyl tak výrazný jako u PSE, a tak se zde paradoxně podařilo stanovit větší množství látek s dostatečnou spolehlivostí a similaritou vůči knihovně spekter i když u PSE extraktu jich bylo viditelně více.



Obrázek 40: 1D TIC chromatogram nejlepšího extraktu z optimalizace termální desorpce

Na následujícím grafu je znázorněný naměřený počet sloučenin v každé skupině stanovovaných analytů. Je zde patrný poměrně vysoký výskyt látek s polárními funkčními skupinami, což pravděpodobně souvisí s vlastnostmi dichlormethanu, který ve své molekule obsahuje dva atomy chlóru. Je zde také dobře pozorovatelná kolísavost termální desorpce, kde je množství spolehlivě stanovených ketonů, aldehydů a karboxylových kyselin s estery mnohem menší než u PSE extrakce, která poskytovala víceméně stejné množství spolehlivě stanovených vyextrahovaných analytů u obou těchto skupin. U čistě nepolárních sloučenin vykazovala termální desorpce vyšší počty vyextrahovaných látek, ale to je právě díky již zmíněnému menšímu vlivu koelucí. Skupina PAHs je zde také tvořena pouze LMW PAHs a halogenované sloučeniny zde spolehlivě nebyly určeny žádné na rozdíl od PSE extrakce.

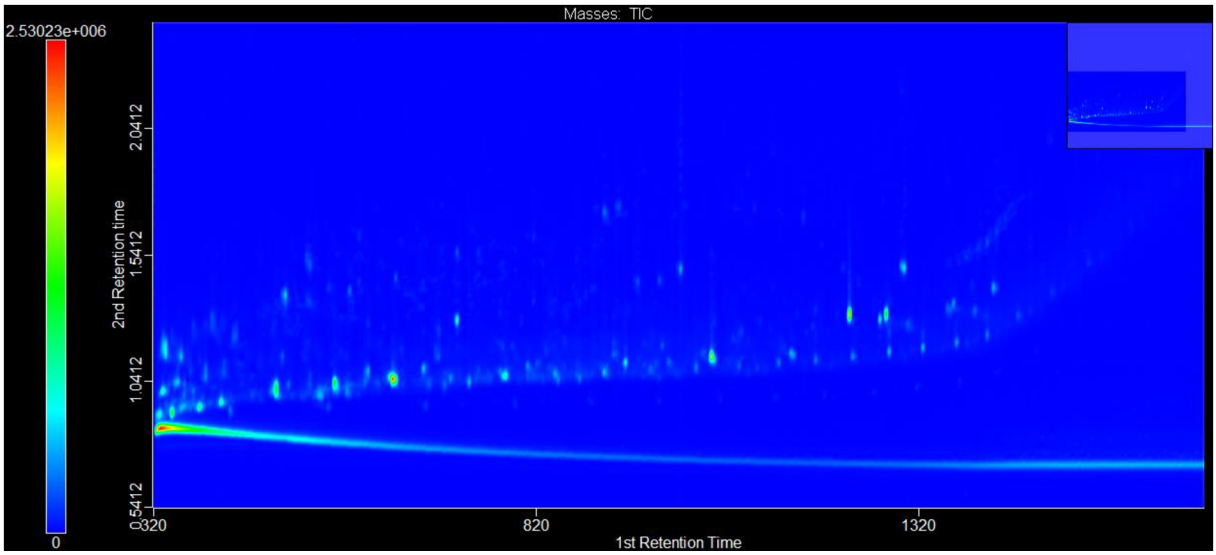


Obrázek 41: Počty látek v jednotlivých skupinách v nejlepších extraktech z optimalizace obou extrakcí

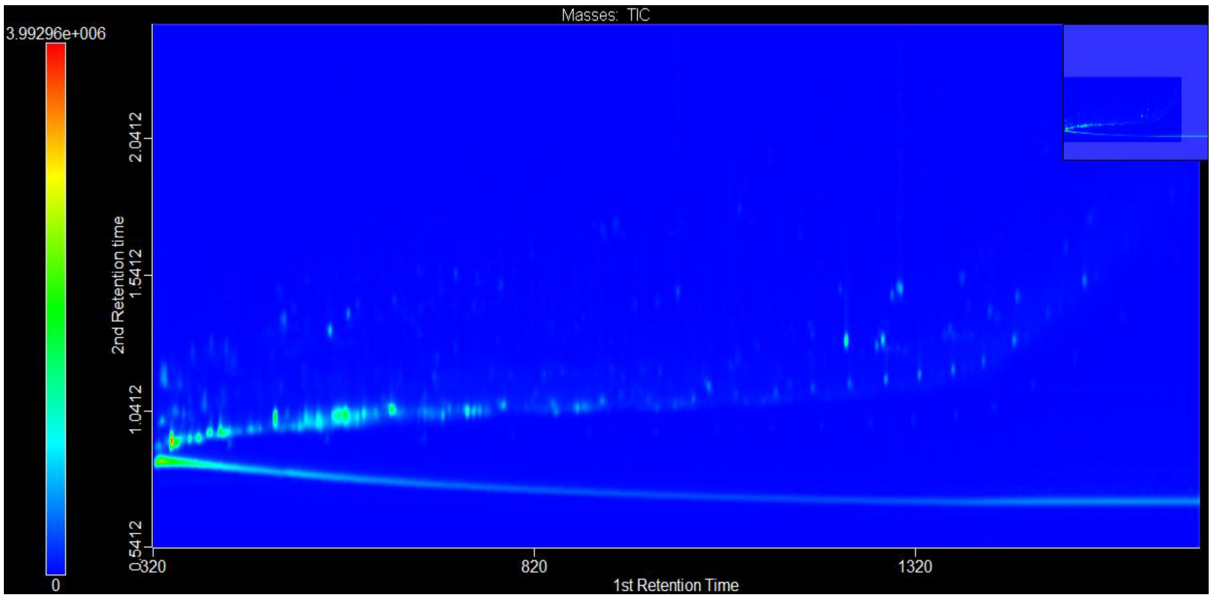
5.4.3 PSE extrakty nejkontaminovanější půdy a příslušného biouhlu

5.4.3.1 Biouhel Novoterra

Využitím dvoudimenzionální chromatografie byly částečně vyřešeny předchozí problémy s koelucí, a tak již bylo spolehlivě stanoveno mnohem větší množství látek, výrazně převyšující předchozí měření v 1D (viz. Obrázek 44). Z následujících 2D chromatogramů lze odhadnout navyšování počtu i koncentrací látek v biouhlu, jelikož zvláště látek eluujících se ze začátku analýzy, je v biouhlu po interakci s půdou mnohem více a i pravděpodobně ve vyšších koncentracích. Na druhou stranu později se eluující látky nemají tak výrazné píky, což naznačuje nižší koncentrace. Obě tyto domněnky potvrzuje kvantitativní analýza tohoto biouhlu (viz. bod 5.3.2.2), ve které po interakci s kambizemí docházelo ke zvýšení koncentrací LMW PAHs, ale naopak ke snížení koncentrací HMW PAHs.

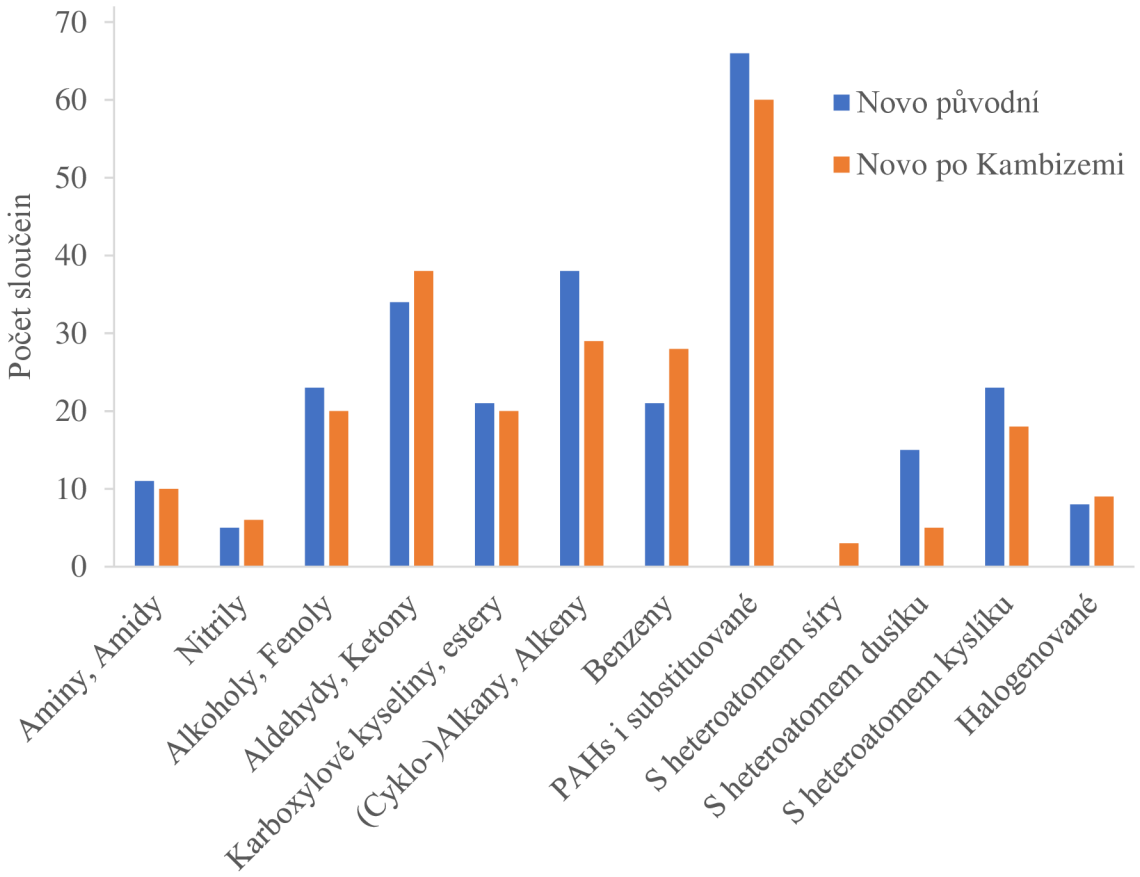


Obrázek 42: 2D TIC chromatogram PSE extraktu z původního biouhlu Novoterra



Obrázek 43: 2D TIC chromatogram PSE extraktu z biouhlu Novoterra po interakci s kambizemí

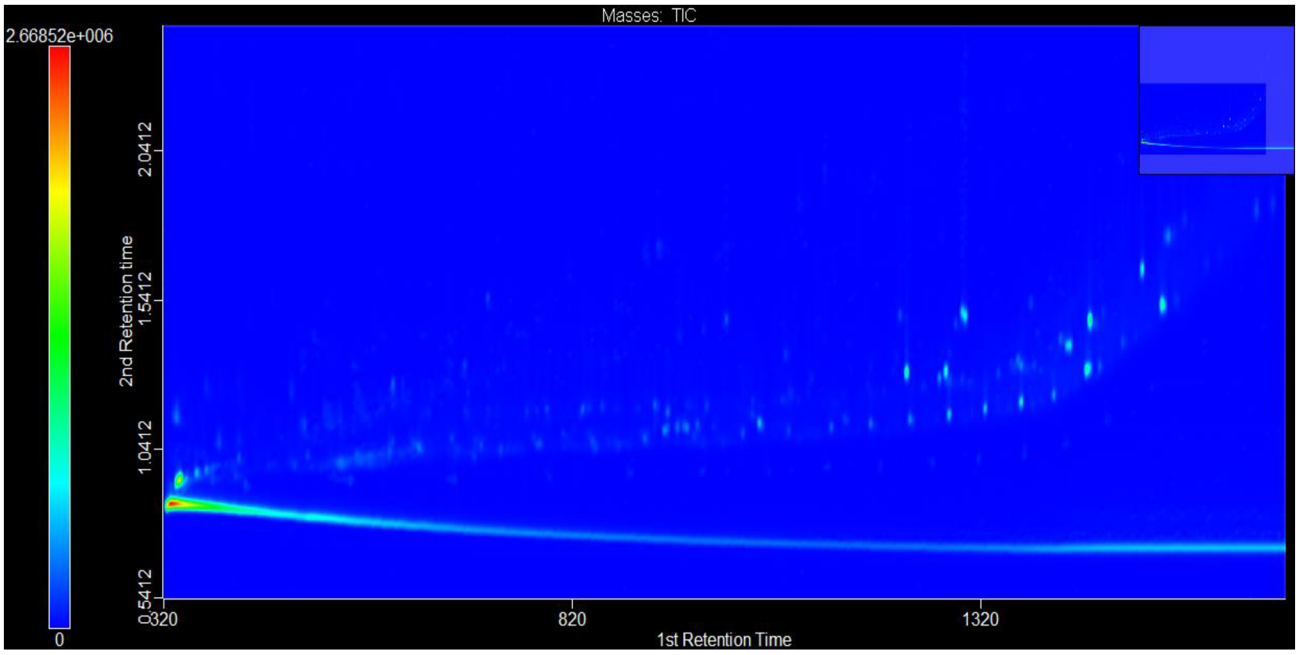
Počty stanovených látek byly v biouhlu před i po interakci obecně spíše stejné a nedocházelo k markantním změnám. Viditelný je zde pokles počtu stanovených PAHs v biouhlu po interakci s půdou související s poklesem koncentrací HMW PAHs. Dalšími skupinami sloučenin u kterých byl zaznamenán mírný pokles počtu spolehlivě stanovených látek byly Aminy, Alkoholy a Fenoly, Karboxylové kyseliny a jejich estery, (Cyklo–)Alkany a Alkeny a sloučeniny s heteroatomem kyslíku nebo dusíku. Všechny tyto látky mohou být využívány jako nutrienty mikroorganismů, a tak pokles jejich počtu může být znamením mikrobiální aktivity, díky které také mohl narůstat počet aldehydů a ketonů.



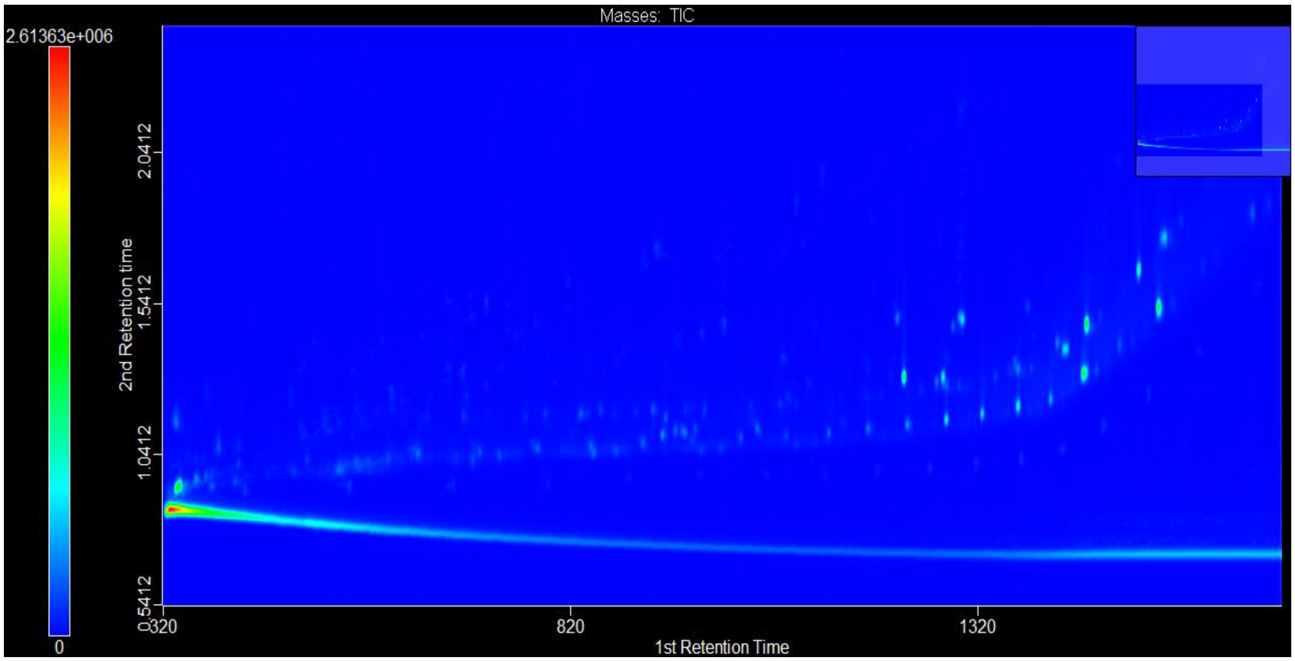
Obrázek 44: Počty látek v jednotlivých skupinách v extraktech z biouhlu Novoterra před i po interakci

5.4.3.2 *Kambizem*

Při porovnání chromatogramů kambizemě původní a po interakci s biouhlem, není na rozdíl od chromatogramů biouhlu patrný žádný výrazný rozdíl. Jen ze vzhledu chromatogramu by šlo usoudit, že nedochází ke zvýšení ani počtu přítomných látek, ani jejich koncentrací, jelikož všechny píky jsou normalizované na ten s nejvyšší intenzitou, kterým je pík toluenu (rozpouštědla). Kvantitativní analýza sice ukazovala nárůst koncentrací analytů, ale konkrétně u této půdy byly měření zatíženy poměrně velkou chybou (viz. bod 5.3.3.3) a tak skutečně nemuselo docházet k navyšování koncentrací, ani počtu kontaminantů v půdě.

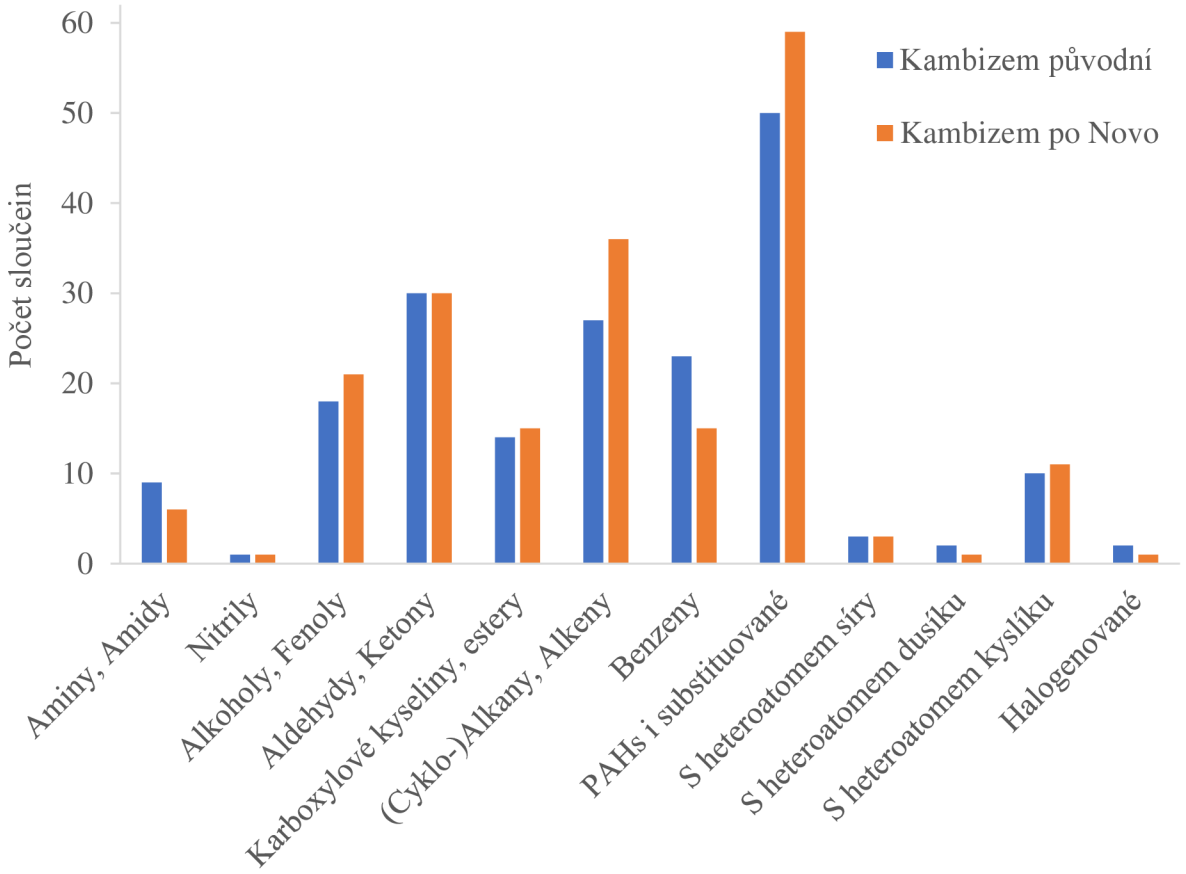


Obrázek 45: 2D TIC chromatogram PSE extraktu z původní kambizemě



Obrázek 46: 2D TIC chromatogram PSE extraktu z kambizemě po interakci s Novoterrou

Při rozdělení analytů do skupin se sice ukázalo mírné zvýšení počtu spolehlivě stanovených Alkoholů a Fenolů, (Cyklo–)Alkanů a Alkenů a také PAHs, ale tyto rozdíly nebyly nijak zvlášť výrazné a obecně se jednalo o mírné nárůsty. Kromě toho také docházelo ke snížení počtu spolehlivě stanovených benzenů a halogenovaných sloučenin, což by mohlo naznačovat jejich sorpci na biouhel, protože u něj docházelo ke zvyšování počtu analytů v těchto skupinách.



Obrázek 47: Počty látek v jednotlivých skupinách v extraktech z kambizemě před i po interakci

5.4.4 Shrnutí a porovnání výsledků kvalitativní analýzy

Pomocí kvalitativní analýzy byly v této diplomové práci v biouhlu stanoveny skupiny volatilních látek jako jsou alkoholy, fenolické látky, aldehydy, ketony a další, a to jak při použití tzv. off – line termální desorpce se záchytem analytů do DCM, tak i při přímé PSE extrakci pomocí DCM. Off – line termální desorpce se ukázala být jako ne příliš spolehlivá metoda v porovnání s PSE extrakcí, jelikož u ní může docházet k velkým ztrátám těkavých analytů už během samotné extrakce a tak byly pozorovány velké rozdíly v počtu nalezených analytů v těchto extraktech oproti PSE extraktům. Analyty se během termální desorpce mohou uvolňovat z promývací lahve díky probublávání dusíkem, což bylo pozorováno i na samotném rozpouštědle, kterého během extrakce vždy vytěkalo odhadem podle rysek na promývací lahvi zhruba 50 ml. Oproti tomu během PSE extrakce by nemělo docházet ke ztrátám analytů, protože se jedná o uzavřený systém a ke ztrátám analytů mohlo docházet jedině až později během manipulace se vzorkem (zakoncentrování apod.). Z tohoto důvodu pak byla pro kvalitativní analýzu brána v potaz pouze PSE extrakce a 2D chromatografická analýza byla prováděna již jen na těchto extraktech. V těch bylo nalezeno díky 2D analýze také kromě těkavých skupin analytů poměrně velké množství PAHs, které již šly spolehlivě stanovit, protože nebyly zatíženy koelucemi. Byly zde také nalezeny halogenované sloučeniny, ovšem překvapivě zde nebyly identifikovány polychlorované bifenyly, což mohlo být zapříčiněno jejich koelucí s jinými látkami což vedlo ke snížení similarity spekter pod určený limit a tak byly z naměřených dat vyfiltrovány při zpracování dat.

Všechny tyto nalezené skupiny těkavých látek jsou v souladu s výsledky studie Spokase a kolektivu [79] ve které bylo stanoveno celkem 140 individuálních látek pomocí headspace online termální desorpce spojené s plynovým chromatografem s hmotnostní detekcí. Tyto látky zahrnovaly zástupce téměř všech skupin látek, které byly stanoveny i v kvalitativní analýze v této práci. Výjimku tvořily aminy, amidy, nitrily, karboxylové kyseliny s estery a sloučeniny s heteroatomem dusíku, které v této práci byly nalezeny navíc, pravděpodobně v důsledku použití vyšší teploty termální desorpce, protože ve výše zmíněné studii používali pro termální desorpci teplotu pouze 150 °C, zatímco v této práci byla pro termální desorpci z biouhlu použita teplota 500 °C, což mohlo napomáhat k desorpci i těchto látek. Ve vzorcích PSE extrakce pomocí DCM byly tyto látky nalezeny také, což lze odůvodnit jeho mírnou polaritou díky chlóru molekule, který napomáhal extrakci těchto látek. Správnost stanovení těchto skupin potvrzuje také studie provedená Maškem a kolektivem [12], ve které byly v biouhlu nalezeni zástupci alkoholů, fenolů, ketonů, ale nyní již i karboxylových kyselin, díky použití extrakce rozpouštědlem sulfidem uhličitým. To také potvrzuje správnost stanovení těchto skupin látek pomocí kvalitativní analýzy provedené v této diplomové práci a naznačuje to také dobrou účinnost dichlormethanu pro extrakci dalších skupin látek stanovených v této práci společně s PAHs, které se dichlormethanem běžně extrahují (viz. bod 2.3.5.3).

6 Závěr

Cílem této diplomové práce byla extrakce a následná analýza PAHs a PCBs ze vzorků biouhlu a půd. Nejprve byla nutná optimalizace extrakční metody s pomocí elektrické trubkové pece pro termální desorpci a extrakční metody na PSE extraktoru.

Při stanovení optimálních podmínek extrakce byly výtěžnosti vnitřních standardů u PSE extrakce v rozmezí 59 – 109,5% pro ty se 2 až 4 cykly v tomto pořadí. Větší chyba výtěžnosti vnitřního standardu pak nastala u deuterovaného perylenu (5 cyklů), kde byla pozitivní chyba a výtěžnost vyšla 193 %, pravděpodobně v důsledku koeluce. Výtěžnosti vnitřních standardů u off – line termální desorpce byly v rozmezí 3,4 – 39 % s tím, že výtěžnost vzrůstala s klesajícím počtem cyklů PAHs. Z tohoto důvodu byla tato metoda vhodná jen pro orientační stanovení a ne pro spolehlivou kvantifikaci.

Jako rozpouštědlo byl zvolen dichlormethan na základě literární rešerše a také díky jeho dobrým vlastnostem pro zakoncentrování vzorku (nízký bod varu a vysoká tenze par). Byl také porovnáván s toluenem, při již stanovených optimálních podmínkách, jelikož ten je normovaným rozpouštědlem při Soxhletově extrakci PAHs. Bylo tak zjištěno že při této extrakci je vhodnější používat dichlormethan, protože poskytoval nižší pozitivní chyby oproti toluenu a také mnohem vyšší výtěžnosti LMW PAHs, které se sice do toluenu také mohly extrahovat, ale pak téměř jistě docházelo k jejich velkým ztrátám při zakoncentrování, což bylo při použití dichlormethanu eliminováno díky jeho výše zmíněným vlastnostem.

Po aplikaci této extrakční techniky na reálné vzorky biouhlu a půd před a po vzájemné interakci a následné kvantifikaci analytů v těchto extraktech z nich bylo zjištěno, že při dlouhodobé interakci dochází pravděpodobně k biodegradaci PAHs, která je podporovaná přídavkem biouhlu do půdy. Koncentrace PAHs se mohly v půdě snižovat i v důsledku sorpce na kořeny rostlin. PCBs které jsou téměř nedegradovatelné za aerobních podmínek se pak na biouhel sorbovaly a docházelo ke snížení jejích koncentrací v půdě, a nebo zůstávaly v rovnováze a jejich koncentrace se výrazně neměnily.

U optimálních extraktů PSE a termální desorpce byla provedena také 1D chromatografická kvalitativní analýza s využitím GC-TOF. Při té bylo nalezeno velké množství sloučenin od dosti těkavých látek až po těžké a různě substituované PAHs, včetně těch obsahujících heteroatomy kyslíku a dusíku. Tento soubor látek byl ještě více rozšířen při kvalitativní analýze vzorků nejkontaminovanější půdy a nejkontaminovanějšího biouhlu na stejném přístroji ale ve 2D.

Budoucí práce by se mohly zabývat další optimalizací extrakční techniky pomocí DCM, například při sledování vlivu tlaku na účinnost extrakce, který v této práci nemohl být sledován kvůli limitaci přístroje. Také by bylo možno dále vylepšit extrakci pomocí termální desorpce, tak aby výtěžnosti analytů byly vyšší, například přímým napojením trubkové pece na plynový chromatograf. Další oblastí výzkumu by mohlo být také právě sledování sorpce PAH sloučenin na kořeny rostlin, případně intenzity mikrobiální degradace těchto sloučenin.

7 Citovaná literatura

[1] KURAŠ, Mečislav. *Odpady a jejich zpracování*. 1. Chrudim: Vodní zdroje Ekomonitor, 2014. ISBN 978-80-86832-80-7.

[2] DHYANI, Vaibhav a Thallada BHASKAR. A comprehensive review on the pyrolysis of lignocellulosic biomass. *Renewable Energy*. 2018, **2018**(129), 695-716. ISSN 09601481. Dostupné z: doi:10.1016/j.renene.2017.04.035

[3] LI, Yunchao, Bo XING, Yan DING, Xinhong HAN a Shurong WANG. A critical review of the production and advanced utilization of biochar via selective pyrolysis of lignocellulosic biomass. *Bioresource Technology*. 2020, **312**. ISSN 09608524. Dostupné z: doi:10.1016/j.biortech.2020.123614

[4] JAHIRUL, Mohammad, Mohammad RASUL, Ashfaque CHOWDHURY a Nanjappa ASHWATH. Biofuels Production through Biomass Pyrolysis —A Technological Review. *Energies*. 2012, **5**(12), 4952-5001. ISSN 1996-1073. Dostupné z: doi:10.3390/en5124952

[5] ZHOU, Yuwen, Shiyi QIN, Shivpal VERMA et al. Production and beneficial impact of biochar for environmental application: A comprehensive review. *Bioresource Technology*. 2021, **337**. ISSN 09608524. Dostupné z: doi:10.1016/j.biortech.2021.125451

[6] TRIPATHI, Manoj, J.N. SAHU a P. GANESAN. Effect of process parameters on production of biochar from biomass waste through pyrolysis: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2016, **55**, 467-481. ISSN 13640321. Dostupné z: doi:10.1016/j.rser.2015.10.122

[7] WANG, Guanyu, Yujie DAI, Haiping YANG, Qingang XIONG, Kaige WANG, Jinsong ZHOU, Yunchao LI a Shurong WANG. *A Review of Recent Advances in Biomass Pyrolysis*. 2020, **34**(12), 15557-15578. ISSN 0887-0624. Dostupné z: doi:10.1021/acs.energyfuels.0c03107

[8] LI, Jing, Jianjun DAI, Guangqing LIU, Hedong ZHANG, Zuopeng GAO, Jie FU, Yanfeng HE a Yan HUANG. Biochar from microwave pyrolysis of biomass: A review. *Biomass and Bioenergy*. 2016, **94**, 228-244. ISSN 09619534. Dostupné z: doi:10.1016/j.biombioe.2016.09.010

[9] WEBER, Kathrin a Peter QUICKER. Properties of biochar. *Fuel*. 2018, **2018**(217), 240-261. ISSN 00162361. Dostupné z: doi:10.1016/j.fuel.2017.12.054

[10] CROMBIE, Kyle, Ondřej MAŠEK, Saran SOHI, Peter BROWNSORT a Andrew CROSS. The effect of pyrolysis conditions on biochar stability as determined by three methods. *GCB Bioenergy*. 2013, **5**(2), 122-131. ISSN 17571693. Dostupné z: doi:10.1111/gcbb.12030

[11] ALLER, Deborah, Santanu BAKSHI a David LAIRD. Modified method for proximate analysis of biochars. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*. 2017, **2017**(124), 335-342. ISSN 01652370. Dostupné z: doi:10.1016/j.jaap.2017.01.012

[12] MAŠEK, Ondřej, Wolfram BUSS a Saran SOHI. Standard Biochar Materials. *Environmental Science & Technology*. 2018, **52**(17), 9543-9544. ISSN 0013-936X. Dostupné z: doi:10.1021/acs.est.8b04053

[13] ROUQUEROL, J., D. AVNIR, C. FAIRBRIDGE et al. Recommendations for the characterization of porous solids (Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*. 1994, **66**(8), 1739-1758. ISSN 1365-3075. Dostupné z: doi:10.1351/pac199466081739

[14] AHMAD, Mahtab, Anushka RAJAPAKSHA, Jung LIM et al. Biochar as a sorbent for contaminant management in soil and water: A review. *Chemosphere*. 2014, **99**, 19-33. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/j.chemosphere.2013.10.071

[15] SEOW, Yee, Yie TAN, N.M. MUBARAK, Jibrail KANSEDO, Mohammad KHALID, Mohd IBRAHIM a Mostafa GHASEMI. A review on biochar production from different biomass wastes by recent carbonization technologies and its sustainable applications. *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 2022, **10**(1). ISSN 22133437. Dostupné z: doi:10.1016/j.jece.2021.107017

[16] DAI, Yingjie, Naixin ZHANG, Chuanming XING, Qingxia CUI a Qiya SUN. The adsorption, regeneration and engineering applications of biochar for removal organic pollutants: A review. *Chemosphere*. 2019, **223**, 12-27. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/j.chemosphere.2019.01.161

[17] KLASSON, K., Craig LEDBETTER, Minori UCHIMIYA a Isabel LIMA. Activated biochar removes 100 % dibromochloropropane from field well water. *Environmental Chemistry Letters*. 2013, **11**(3), 271-275. ISSN 1610-3653. Dostupné z: doi:10.1007/s10311-012-0398-7

[18] LYU, Honghong, Yuhe HE, Jingchun TANG, Markus HECKER, Qinglong LIU, Paul JONES, Garry CODLING a John GIESY. Effect of pyrolysis temperature on potential toxicity of biochar if applied to the environment. *Environmental Pollution*. 2016, **218**, 1-7. ISSN 02697491. Dostupné z: doi:10.1016/j.envpol.2016.08.014

[19] WANG, Congying, Yingdi WANG a H.M.S.K. HERATH. Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in biochar – Their formation, occurrence and analysis: A review. *Organic Geochemistry*. 2017, **114**, 1-11. ISSN 01466380. Dostupné z: doi:10.1016/j.orggeochem.2017.09.001

[20] DAI, Chaomeng, Yueming HAN, Yanping DUAN et al. Review on the contamination and remediation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in coastal soil and sediments. *Environmental Research*. 2022, **205**. ISSN 00139351. Dostupné z: doi:10.1016/j.envres.2021.112423

[21] REIZER, Edina, Béla VISKOLCZ a Béla FISER. Formation and growth mechanisms of polycyclic aromatic hydrocarbons: A mini-review. *Chemosphere*. 2022, **291**. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/j.chemosphere.2021.132793

[22] SEI, Kento, Qi WANG, Masahiro TOKUMURA, Yuichi MIYAKE a Takashi AMAGAI. Accurate and ultrasensitive determination of 72 parent and halogenated polycyclic aromatic hydrocarbons in a variety of environmental samples via gas chromatography–triple quadrupole mass spectrometry. *Chemosphere*. 2021, **271**. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/j.chemosphere.2021.129535

[23] ABDEL-SHAFY, Hussein a Mona MANSOUR. A review on polycyclic aromatic hydrocarbons: Source, environmental impact, effect on human health and remediation. *Egyptian Journal of Petroleum*. 2016, **25**(1), 107-123. ISSN 11100621. Dostupné z: doi:10.1016/j.ejpe.2015.03.011

[24] BRAZKOVA, Mariya a Albert KRASTANOV. Polycyclic aromatic hydrocarbons: Sources, effects and biodegradation. *Conference: International Scientific Conference of University of Ruse*. 2013, **102**(52).

[25] BUSS, Wolfram, Ondřej MAŠEK, Margaret GRAHAM a Dominik WÜST. Inherent organic compounds in biochar–Their content, composition and potential toxic effects. *Journal of Environmental Management*. 2015, **156**, 150-157. ISSN 03014797. Dostupné z: doi:10.1016/j.jenvman.2015.03.035

[26] GODLEWSKA, Paulina, Yong OK a Patryk OLESZCZUK. THE DARK SIDE OF BLACK GOLD: Ecotoxicological aspects of biochar and biochar-amended soils. *Journal of Hazardous Materials*. 2021, **403**. ISSN 03043894. Dostupné z: doi:10.1016/j.jhazmat.2020.123833

[27] DUTTA, Tanushree, Eilhann KWON, Satya BHATTACHARYA, Byong JEON, Akash DEEP, Minori UCHIMIYA a Ki-Hyun KIM. Polycyclic aromatic hydrocarbons and volatile organic compounds in biochar and biochar-amended soil: a review. *GCB Bioenergy*. 2017, **9**(6), 990-1004. ISSN 17571693. Dostupné z: doi:10.1111/gcbb.12363

[28] YASIR, Muhammad, Muhammad SIDDIQUE, Zunera SHABBIR, Habib ULLAH, Luqman RIAZ, Waqar-Un- NISA, SHAFEEQ-UR-RAHMAN a Anis SHAH. Biotreatment potential of co-contaminants hexavalent chromium and polychlorinated biphenyls in industrial wastewater: Individual and simultaneous prospects. *Science of The Total Environment*. 2021, **779**. ISSN 00489697. Dostupné z: doi:10.1016/j.scitotenv.2021.146345

[29] ZHU, Minghan, Yibo YUAN, Hua YIN, Zhanyu GUO, Xipeng WEI, Xin QI, Hang LIU a Zhi DANG. Environmental contamination and human exposure of polychlorinated biphenyls (PCBs) in China: A review. *Science of The Total Environment*. 2022, **805**. ISSN 00489697. Dostupné z: doi:10.1016/j.scitotenv.2021.150270

[30] FAROON, Obaid a Patricia RUIZ. Polychlorinated biphenyls. *Toxicology and Industrial Health*. 2016, **32**(11), 1825-1847. ISSN 0748-2337. Dostupné z: doi:10.1177/0748233715587849

[31] REDDY, A., M. MONIRUZZAMAN a Tejraj AMINABHAVI. Polychlorinated biphenyls (PCBs) in the environment: Recent updates on sampling, pretreatment, cleanup technologies and their analysis. *Chemical Engineering Journal*. 2019, **358**, 1186-1207. ISSN 13858947. Dostupné z: doi:10.1016/j.cej.2018.09.205

[32] ZAYNAB, Madiha, Mahpara FATIMA, Yasir SHARIF, Kalsoom SUGHRA, Mateen SAJID, Khalid KHAN, A.H. SNEHARANI a Shuangfei LI. Health and environmental effects of silent killers Organochlorine pesticides and polychlorinated biphenyl. *Journal of King Saud University - Science*. 2021, **33**(6). ISSN 10183647. Dostupné z: doi:10.1016/j.jksus.2021.101511

[33] MWANZA, Moses, Elizabeth NDUNDA, Geoffrey BOSIRE, Vincent NYAMORI a Bice MARTINCIGH. Advances in sample pretreatment and detection of PCBs in the environment. *Journal of Hazardous Materials Advances*. 2021, **4**. ISSN 27724166. Dostupné z: doi:10.1016/j.hazadv.2021.100028

[34] HILBER, Isabel, Franziska BLUM, Jens LEIFELD, Hans-Peter SCHMIDT a Thomas BUCHELI. Quantitative Determination of PAHs in Biochar: A Prerequisite To Ensure Its Quality and Safe Application. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2012, **60**(12), 3042-3050. ISSN 0021-8561. Dostupné z: doi:10.1021/jf205278v

[35] ODINGA, Emmanuel, Fredrick GUDDA, Michael WAIGI, Jian WANG a Yanzheng GAO. Occurrence, formation and environmental fate of polycyclic aromatic hydrocarbons in biochars. *Fundamental Research*. 2021, **1**(3), 296-305. ISSN 26673258. Dostupné z: doi:10.1016/j.fmre.2021.03.003

[36] LAU, E., S. GAN a H. NG. Extraction Techniques for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Soils. *International Journal of Analytical Chemistry*. 2010, **2010**, 1-9. ISSN 1687-8760. Dostupné z: doi:10.1155/2010/398381

[37] HALE, Sarah, Johannes LEHMANN, David RUTHERFORD et al. *Quantifying the Total and Bioavailable Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Dioxins in Biochars*. 2012, **46**(5), 2830-2838. ISSN 0013-936X. Dostupné z: doi:10.1021/es203984k

[38] LUQUE DE CASTRO, M.D. a F. PRIEGO-CAPOTE. Soxhlet extraction: Past and present panacea. *Journal of Chromatography A*. 2010, **1217**(16), 2383-2389. ISSN 00219673. Dostupné z: doi:10.1016/j.chroma.2009.11.027

[39] ASHOKKUMAR, Muthupandian. The characterization of acoustic cavitation bubbles – An overview. *Ultrasonics Sonochemistry*. 2011, **18**(4), 864-872. ISSN 13504177. Dostupné z: doi:10.1016/j.ultsonch.2010.11.016

[40] DIAS, Arthur, Ana DE AGUIAR a Maurício ROSTAGNO. Extraction of natural products using supercritical fluids and pressurized liquids assisted by ultrasound: Current status and trends. *Ultrasonics Sonochemistry*. 2021, **74**. ISSN 13504177. Dostupné z: doi:10.1016/j.ultsonch.2021.105584

[41] SUN, Fusheng, David LITTLEJOHN a Mark DAVID GIBSON. Ultrasonication extraction and solid phase extraction clean-up for determination of US EPA 16 priority pollutant polycyclic aromatic hydrocarbons in soils by reversed-phase liquid chromatography with ultraviolet absorption detection1Presented in part at FACSS, the 23rd Annual Conference of the Federation of Analytical Chemistry and Spectroscopy Societies, Kansas City, MO, USA, 29 September–4 October 1996.1. *Analytica Chimica Acta*. 1998, **364**(1-3), 1-11. ISSN 00032670. Dostupné z: doi:10.1016/S0003-2670(98)00186-X

[42] GUERIN, Turlough F. The extraction of aged polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) residues from a clay soil using sonication and a Soxhlet procedure: a comparative study. *Journal of Environmental Monitoring*. **1**(1), 63-67. ISSN 14640325. Dostupné z: doi:10.1039/a807307d

[43] SMITH, Kilian, Grant NORTHCOTT a Kevin JONES. Influence of the extraction methodology on the analysis of polycyclic aromatic hydrocarbons in pasture vegetation. *Journal of Chromatography A*. 2006, **1116**(1-2), 20-30. ISSN 00219673. Dostupné z: doi:10.1016/j.chroma.2006.03.040

[44] STEPHENS, Daniel, Tammy MCFADDEN, O.David HEATH a Robert MAULDIN. The effect of sonication on the recovery of polycyclic aromatic hydrocarbons from coal stack ash surfaces. *Chemosphere*. 1994, **28**(10), 1741-1747. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/0045-6535(94)90022-1

[45] ANDREU, Vicente a Yolanda PICÓ. Pressurized liquid extraction of organic contaminants in environmental and food samples. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2019, **118**, 709-721. ISSN 01659936. Dostupné z: doi:10.1016/j.trac.2019.06.038

[46] PINTADO-HERRERA, Marina, Eduardo GONZÁLEZ-MAZO a Pablo LARA-MARTÍN. In-cell clean-up pressurized liquid extraction and gas chromatography–tandem mass spectrometry determination of hydrophobic persistent and emerging organic pollutants in coastal sediments. *Journal of Chromatography A*. 2016, **1429**, 107-118. ISSN 00219673. Dostupné z: doi:10.1016/j.chroma.2015.12.040

[47] SCHANTZ, Michele, John NICHOLS a Stephen WISE. Evaluation of Pressurized Fluid Extraction for the Extraction of Environmental Matrix Reference Materials. *Analytical Chemistry*. 1997, **69**(20), 4210-4219. ISSN 0003-2700. Dostupné z: doi:10.1021/ac970299c

[48] LEHOTAY, S.J. a F.J. SCHENCK. MULTIRESIDUE METHODS: EXTRACTION. *Encyclopedia of Separation Science*. Elsevier, 2000, 3409-3415. ISBN 9780122267703. Dostupné z: doi:10.1016/B0-12-226770-2/05621-0

[49] ZHAO, Cheng, Yan DONG, Yupeng FENG, Yuzhong LI a Yong DONG. Thermal desorption for remediation of contaminated soil: A review. *Chemosphere*. 2019, **221**, 841-855. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/j.chemosphere.2019.01.079

[50] BULMăU, Cora, Cosmin MăRCULESCU, Shengyong LU a Zhifu QI. Analysis of thermal processing applied to contaminated soil for organic pollutants removal. *Journal of Geochemical Exploration*. 2014, **147**, 298-305. ISSN 03756742. Dostupné z: doi:10.1016/j.gexplo.2014.08.005

[51] QI, Zhifu, Tong CHEN, Sihong BAI et al. Effect of temperature and particle size on the thermal desorption of PCBs from contaminated soil. *Environmental Science and Pollution Research*. 2014, **21**(6), 4697-4704. ISSN 0944-1344. Dostupné z: doi:10.1007/s11356-013-2392-4

[52] POSTER, Dianne, Michele SCHANTZ, Lane SANDER a Stephen WISE. Analysis of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in environmental samples: a critical review of gas chromatographic (GC) methods. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2006, **386**(4), 859-881. ISSN 1618-2642. Dostupné z: doi:10.1007/s00216-006-0771-0

[53] LEÓN, V.M, B ÁLVAREZ, M.A COBOLLO, S MUñOZ a I VALOR. Analysis of 35 priority semivolatile compounds in water by stir bar sorptive extraction–thermal desorption–gas chromatography–mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. 2003, **999**(1-2), 91-101. ISSN 00219673. Dostupné z: doi:10.1016/S0021-9673(03)00600-9

[54] TESKE, J a W ENGEWALD. Methods for, and applications of, large-volume injection in capillary gas chromatography. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2002, **21**(9-10), 584-593. ISSN 01659936. Dostupné z: doi:10.1016/S0165-9936(02)00801-4

[55] ADHIKARI, Puspa, Edward OVERTON, Deepa PANGENI a Bishnu REGMI. Application of individual response factors for accurate quantitation of alkylated PAH homologs in complex environmental samples using gas chromatography/triple quadrupole mass spectrometry (GC–MS/MS). *Microchemical Journal*. 2022, **174**. ISSN 0026265X. Dostupné z: doi:10.1016/j.microc.2021.107074

[56] VAN LEEUWEN, S.P.J. a J. DE BOER. Advances in the gas chromatographic determination of persistent organic pollutants in the aquatic environment. *Journal of Chromatography A*. 2008, **1186**(1-2), 161-182. ISSN 00219673. Dostupné z: doi:10.1016/j.chroma.2008.01.044

[57] ROCHA, Maria, Ana RIBEIRO, Diana CAMPOS a Eduardo ROCHA. Temporal-spatial survey of PAHs and PCBs in the Atlantic Iberian northwest coastline, and evaluation of their sources and risks for both humans and aquatic organisms. *Chemosphere*. 2021, **279**. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/j.chemosphere.2021.130506

[58] CASTANHEIRO, Ana, Pieter JOOS, Karen WUYTS, Karolien DE WAEL a Roeland SAMSON. Leaf-deposited semi-volatile organic compounds (SVOCs): An exploratory study using GCxGC-TOFMS on leaf washing solutions. *Chemosphere*. 2019, **214**, 103-110. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/j.chemosphere.2018.09.067

[59] *Standardized Product Definition and Product Testing Guidelines for Biochar That Is Used in Soil* [online]. USA: International biochar initiative, 2015 [cit. 2022-04-19]. Dostupné z: https://biochar-international.org/characterizationstandard/

[60] *EPA Method 3540 (SW-846): Soxhlet Extraction*. Verze C. Washington DC.: U.S. EPA, 1996.

[61] *EPA Method 8270 (SW-846): Semivolatile Organic Compounds by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC-MS)*. Verze E. Washington, DC.: U.S. EPA, 2014.

[62] *EPA Method 8082 (SW-846): Polychlorinated Biphenyls (PCBs) by Gas Chromatography*. Verze A. Washington DC.: U.S. EPA, 2007.

[63] *EPA Method 8275 (SW-846): Semivolatile Organic Compounds in Soil/Sludges and Solid Wastes Using Thermal Extraction/Gas Chromatography/Mass Spectrometry (TE/GC/MS)*. Verze A. Washington DC.: U.S. EPA, 1996.

[64] *Analytical methods: A detailed description of the EBC analytical methods developed and accredited for biochar*. [online]. Switzerland: EBC guidelines, 2022 [cit. 2022-04-20]. Dostupné z: https://www.european-biochar.org/en/ct/8-Analytical-Methods

[65] Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Food - Scientific Opinion of the Panel on Contaminants in the Food Chain. *EFSA Journal*. 2008, **6**(8). ISSN 18314732. Dostupné z: doi:10.2903/j.efsa.2008.724

[66] *Guidelines of the European Biochar Certificate - Version 10.1: Guidelines for a sustainable production of biochar* [online]. Switzerland: EBC guidelines, 2022 [cit. 2022-04-20]. Dostupné z: https://www.european-biochar.org/en/ct/2-EBC-guidelines-documents

[67] WARD, Chesworth, ed. *ENCYCLOPEDIA OF SOIL SCIENCE*. 2. PO Box 17, 3300 AA Dordrecht, Netherlands: Springer, 2008. ISBN 978-1-4020-3994-2.

[68] MCCARTHY, David F. *Essentials of Soil Mechanics and Foundations: Basic Geotechnics*. 7. Edinburgh Gate, Harlow, Essex: Pearson Education Limited, 2014. ISBN 978-1-292-03939-8.

[69] *ASTM D2487-17 Standard Practice For Classification Of Soils For Engineering Purposes: Unified Soil Classification System*. 1. 100 Barr Harbor Dr, Conshohocken, PA 19428, USA: ASTM international, 2017.

[70] WHITE, Robert E. *Principles and Practice of Soil Science: The Soil as a Natural Resource*. 4. 9600 Garsington Road, Oxford OX4 2DQ, UK: Blackwell Science Ltd., 2006. ISBN 978-0-632-06455-7.

[71] BOHN, Hinrich, Brian MCNEAL a George O'CONNOR. *Soil Chemistry*. 3. New York, USA: John Wiley and Sons Inc., 2001. ISBN 0-471-36339.

[72] BRADY, Nyle C. *The Nature and Properties of Soils*. 15. Edinburgh Gate, Harlow, Essex, England: Pearson Education Limited, 2017. ISBN 978-1-292-16223-2.

[73] RATTAN, Lal. *Encyclopedia of Soil Science*. 3. Boca Raton, USA: CRC Press, 2017. ISBN 978-1-4987-8699-7.

[74] JONES JR., J. Benton. *Plant nutrition and soil fertility*. 2. Boca Raton, USA: CRC Press, 2012. ISBN 978-1-4398-1610.

[75] *Bioavailability of contaminants in soils and sediments: Processes, Tools and Applications*. 1. 500 5th St., N.W. Washington D.C.: The national academies press, 2003. ISBN 0-309-08625-6.

[76] SOJA, G. Interactions of Biochar and Biological Degradation of Aromatic Hydrocarbons in Contaminated Soil. *Biochar Application*. 1. Radarweg 29, PO Box 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands: Elsevier, 2016, s. 247-267. ISBN 9780128034330. Dostupné z: doi:10.1016/B978-0-12-803433-0.00010-2

[77] ŠTORKOVÁ, Natálie. *Optimalizace metod pro posouzení vlivu biouhlu na růst modelových rostlin*. Brno, 2021. Bakalářská práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta Chemická. Vedoucí práce Ing. Michal Kalina, Ph.D.

[78] *Chemical analysis - Decision limit, detection limit and determination limit under repeatability conditions: Terms, methods, evaluation.* 1. Německo: Deutsches Institut fur Normung E.V. (DIN), 2008.

[79] SPOKAS, Kurt A., Jeffrey M. NOVAK, Catherine E. STEWART, Keri B. CANTRELL, Minori UCHIMIYA, Martin G. DUSAIRE a Kyoung S. RO. Qualitative analysis of volatile organic compounds on biochar. *Chemosphere*. 2011, **85**(5), 869-882. ISSN 00456535. Dostupné z: doi:10.1016/j.chemosphere.2011.06.108

8 Seznam obrázků

Obrázek 1: Porovnání konvenčního a mikrovlnného způsobu ohřevu [7] 9
Obrázek 2: Příklady vstupních materiálu a výsledného biouhlu [12] 10
Obrázek 3: Van Krevelenův diagram [9] 11
Obrázek 4: Skupina 16 parentálních PAHs podle EPA [21] 17
Obrázek 5: Obecný vzorec polychlorovaných bifenylů [30] 20
Obrázek 6: Sedm indikátorových PCB sloučenin [33] 21
Obrázek 7: Klasická Soxhletova extrakce [38] a automatizovaný extraktor [vlastní foto] 22
Obrázek 8: Schéma PSE extraktoru [45] 24
Obrázek 9: Zjednodušené cykly energie a materiálu procházející přes půdu [67] 30
Obrázek 10: Lodička s naváženým vzorkem 41
Obrázek 11: Aparatura s trubkovou pecí a vakuová rotační odparka 42
Obrázek 12: Výtěžnosti vnitřních standardů v optimalizaci PSE extrakce 48
Obrázek 13: Koncentrace jednotlivých skupin analytů v optimalizaci PSE extrakce 49
Obrázek 14: Porovnání výtěžností vnitřních standardů u dichlormethanu a toluenu 50
Obrázek 15: Koncentrace skupin analytů při porovnáni dichlormethanu a toluenu 50
Obrázek 16: Koncentrace skupin látek při optimalizaci termální desorpce 51
Obrázek 17: Výtěžnosti vnitřních standardů při optimalizaci teploty termální desorpce 52
Obrázek 18: Koncentrace skupin analytů při optimalizaci teploty termální desorpce 52
Obrázek 19: Výtěžnosti vnitřních standardů u opakovaných optimálních extrakcí 53
Obrázek 20: Koncentrace skupin analytů v opakovaných optimálních PSE extrakcích 54
Obrázek 21: Koncentrace skupin analytů v opakovaných optimálních termálních desorpcích 54
Obrázek 22: Koncentrace indikátorových skupin a individuálních PAHs podle EBC 55
Obrázek 23: Koncentrace skupin všech stanovovaných analytů v původních biouhlech 56
Obrázek 24: Koncentrace indikátorových skupin v biouhlu Sonnnenerde před a po interakci s půdou 57
Obrázek 25: Koncentrace všech analytů podle cyklů v biouhlu Sonnenerde před a po půdní interakci 58
Obrázek 26: Koncentrace indikátorových skupin v biouhlu Novoterra před a po interakci s půdou 58
Obrázek 27: Koncentrace všech analytů podle cyklů v biouhlu Novoterra před a po půdní interakci 59

Obrázek 28: Koncentrace indikátorových skupin v půdě TA ČR před a po interakci s biouhlem 60

Obrázek 29: Koncentrace všech analytů podle cyklů v půdě TA ČR před a po interakci s biouhlem 60

Obrázek 30: Koncentrace indikátorových skupin v černozemi před a po interakci s biouhlem 61

Obrázek 31: Koncentrace všech analytů podle cyklů v černozemi před a po interakci s biouhlem 61

Obrázek 32: Koncentrace indikátorových skupin v kambizemi před a po interakci s biouhlem 62

Obrázek 33: Koncentrace všech analytů podle cyklů v kambizemi před a po interakci s biouhlem 62

Obrázek 34: Koncentrace indikátorových skupin ve fluvizemi před a po interakci s biouhlem 63

Obrázek 35: Koncentrace všech analytů podle cyklů ve fluvizemi před a po interakci s biouhlem 63

Obrázek 36: Koncentrace indikátorových skupin ve vzorcích použitých při termální desorpci 64

Obrázek 37: Koncentrace všech analytů podle cyklů v biouhlu Novoterra při termální desorpci 65

Obrázek 38: Koncentrace všech analytů podle cyklů v kambizemi při termální desorpci 65

Obrázek 39: 1D TIC chromatogram nejlepšího extraktu z PSE optimalizace 67

Obrázek 40: 1D TIC chromatogram nejlepšího extraktu z optimalizace termální desorpce ... 68

Obrázek 41: Počty látek v jednotlivých skupinách v nejlepších extraktech z optimalizace obou extrakcí 68

Obrázek 42: 2D TIC chromatogram PSE extraktu z původního biouhlu Novoterra 69

Obrázek 43: 2D TIC chromatogram PSE extraktu z biouhlu Novoterra po interakci s kambizemí 69

Obrázek 44: Počty látek v jednotlivých skupinách v extraktech z biouhlu Novoterra před i po interakci 70

Obrázek 45: 2D TIC chromatogram PSE extraktu z původní kambizemě 71

Obrázek 46: 2D TIC chromatogram PSE extraktu z kambizemě po interakci s Novoterrou .. 71

Obrázek 47: Počty látek v jednotlivých skupinách v extraktech z kambizemě před i po interakci 72

9 Seznam tabulek

Tabulka 1: Podmínky pro stanovení PAHs na GC-MS normou DIN 16181: 2019-08 [64] 27
Tabulka 2: Limity kontaminantů a charakteristiky tříd biouhlu podle EBC [66] 29
Tabulka 3: Látky obsažené ve směsném standardu PAHs 38
Tabulka 4: Látky obsažené ve směsném standardu PCB 38
Tabulka 5: Látky obsažené ve směsném standardu deuterovaných PAHs 38
Tabulka 6: Použité vzorky biouhlu 39
Tabulka 7: Koncentrace jednotlivých bodu koncentrační řady 40
Tabulka 8: Parametry jednotlivých experimentů pro každou teplotu termální desorpce 42
Tabulka 9: Parametry PSE experimentů 43
Tabulka 10: Podmínky 1D kvalitativní analýzy 44
Tabulka 11: Podmínky 2D kvalitativní analýzy 45
Tabulka 12: Parametry chromatografické separace na chromatografu Bruker 45
Tabulka 13: LOD a LOQ jednotlivých analytů v reálných vzorcích 46
Tabulka 14: Pokračování LOD a LOQ jednotlivých analytů v reálných vzorcích 47
Tabulka 15: MRM parametry stanovení jednotlivých analytů 89
Tabulka 16: Koncentrace jednotlivých analytů v řadě extraktů u PSE optimalizace 90
Tabulka 17: Koncentrace jednotlivých analytů při srovnání DCM a Toluenu pro PSE extrakci 91
Tabulka 18: Koncentrace jednotlivých analytů v optimalizaci termální desorpce 92
Tabulka 19: Koncentrace jednotlivých analytů při optimalizaci teploty u termální desorpce . 93
Tabulka 20: Koncentrace jednotlivých analytů v opakovaných optimálních extrakcích 94
Tabulka 21: Koncentrace jednotlivých analytů v PSE extraktech z původních biouhlů 95
Tabulka 22: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Sonnenerde a půdy TA ČR .. 96
Tabulka 23: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Sonnenerde a černozemě 97
Tabulka 24: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Sonnenerde a kambizemě 98
Tabulka 25: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Sonnenerde a fluvizemě 99
Tabulka 26: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Novoterra a půdy TA ČR .. 100
Tabulka 27: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Novoterra a černozemě 101
Tabulka 28: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Novoterra a kambizemě 102
Tabulka 29: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Novoterra a fluvizemě 103
Tabulka 30: Koncentrace všech analytů v extraktech pomocí termální desorpce 104

Tabulka 31: Všechny stanovené analyty v optimálním extraktu z PSE optimalizace 1.část . 105

Tabulka 32: Všechny stanovené analyty v optimálním extraktu z PSE optimalizace 2.část . 106

Tabulka 33: Všechny stanovené analyty v optimálním extraktu z optimalizace termální desorpce 1.část 107

Tabulka 34: Všechny stanovené analyty v optimálním extraktu z optimalizace termální desorpce 2.část 108

Tabulka 35: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původního biouhlu Novoterra 1.část 109

Tabulka 36: 1. Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původního biouhlu Novoterra 2.část..... 110

Tabulka 37: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původního biouhlu Novoterra 3.část 111

Tabulka 38: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původního biouhlu Novoterra 4.část 112

Tabulka 39: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu biouhlu Novoterra po kambizemi 1.část..... 113

Tabulka 40: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu biouhlu Novoterra po kambizemi 2.část..... 114

Tabulka 41: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu biouhlu Novoterra po kambizemi 3.část..... 115

Tabulka 42: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu biouhlu Novoterra po kambizemi 4.část..... 116

Tabulka 43: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původní kambizemě 1.část 117

Tabulka 44: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původní kambizemě 2.část 118

Tabulka 45: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původní kambizemě 3.část 119

Tabulka 46: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu kambizemě po biouhlu Novoterra 1.část..... 120

Tabulka 47: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu kambizemě po biouhlu Novoterra 2.část..... 121

Tabulka 48: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu kambizemě po biouhlu Novoterra 3.část..... 122

10 Seznam použitých zkratek

PAHs	Polycyklické aromatické uhlovodíky
PCBs	Polychlorované bifenyly
BET	Braunerova, Emmetova a Tellerova izoterma
ČOV	Čistička odpadních vod
DNA	Deoxyribonukleová kyselina
LMW PAHs	Nízkomolekulární polycyklické aromatické uhlovodíky
HMW PAHS	Vysokomolekulární polycyklické aromatické uhlovodíky
VOCs	Volatilní organické sloučeniny
POPs	Perzistentní organické polutanty
PSE	Extrakce podporovaná tlakem
MUSK	Syntetické organické vonné sloučeniny
SIM	„Selected Ion monitoring“
MRM	„Multiple reaction monitoring“
ECD	„Electron capture detector“
EPA	Agentura pro ochranu životního prostředí
IBI	„International biochar initiative“
EBC	„European biochar certification“
EFSA	„European food safety authority“
TGA	Termogravimetrická analýza
GC – MS	Plynová chromatografie ve spojení s hmotnostní spektrometrií
PTFE	Polytetrafluorethylen
LOD	Mez detekce
LOQ	Mez stanovitelnosti
DCM	Dichlormethan

11 Přílohy

Tabulka 15: MRM parametry stanovení jednotlivých analytů

Analyt	Retenční čas [min]	Kvantifikační reakce	Kvalifikační reakce	Iontový poměr
Benzofuran	3,14	118>89	89>63	0,360
Indan	3,28	117>115	117>91	0,440
Inden	3,45	116>115	116>89	0,150
Naftalen-D8	4,80	136>134	136>108	0,562
Naftalen	4,83	128>102	128>127	0,871
Benzo[b]thiofen	5,02	134>89	134>68,9	0,280
Chinolin	5,61	129>102	129>128	0,160
2 – methylnaftalen	5,77	142>141	142>115	0,390
Isochinolin	5,83	129>128	129>102	0,511
1 – methylnaftalen	5,98	142>115	142>141	0,526
Indol	6,22	117>89	117>90	0,729
Bifenyl	6,57	154>153	154>76	0,075
2,6 – dimethylnaftalen	6,67	156>141	156>115	0,750
Acenaftylen	7,43	152>151	152>126	0,443
Acenaften-D10	7,45	164>160	164>162	0,680
Acenaften	7,65	154>153	154>152	0,516
Dibenzofuran	7,88	168>139	168>168	0,550
2,3,6 – trimethylnaftalen	8,02	170>155	170>169	0,045
Fluoren	8,48	166>165	165>163	0,232
Dibenzothiofen	10,02	184>138,9	184>151,9	0,340
Fenantren-D10	10,19	188>184	188>160	0,750
Fenantren	10,23	178>152	178>176	0,619
Antracen	10,30	178>152	178>176	0,700
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	10,52	256>186	258>188	0,270
Akridin	10,54	179>151	179>178	0,878
Fenantridin	10,75	179>150,9	179>126,1	0,178
Karbazol	10,93	167>138,8	167>115	0,287
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	10,97	290>220	290>255	0,330
1-methylfenantren	11,22	192>189	192>191	0,370
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	12,03	324>254	326>256	0,985
Fluoranten	12,29	202>200	202>152	0,243
Pyren	12,78	202>200	202>152	0,095
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	13,00	326>256	324>254	1,012
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	13,18	360>290	358>288	0,809
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	13,88	360>290	358>288	1,007
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	15,20	394>324	324>254	0,440
Benz[a]antracen	16,25	228>226	228>202	0,200
Chrysen-D12	16,45	240>240	240>236	0,218
Chrysen	16,57	228>226	228>224	0,070
Benzo[b]fluoranten	21,95	252>250	252>226	0,135
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	22,05	256>239	256>255	0,065
Benzo[k]fluoranten	22,08	252>250	252>226	0,130
Benzo[e]pyren	23,24	252>250	252>248	0,070
Benzo[a]pyren	23,47	252>250	252>248	0,070
Perylene-d12	23,77	264>264	264>260	0,350
Perylen	23,86	252>252	252>250	0,272
3 – methylcholanthren	24,36	268>252	268>266	0,136
Indeno(1,2,3-cd)pyren	26,55	276>274	276>272	0,280
Dibenzo[a,h]antracen	26,59	278>276	278>252	0,080
Benzo[ghi]perylen	27,27	276>274	276>272	0,217

Tabulka 16: Koncentrace jednotlivých analytů v řadě extraktů u PSE optimalizace

Tlak 90 bar u všech	**90 °C 10 min**	**90 °C 15 min**	**90 °C 20 min**	**110 °C 10 min**	**110 °C 15 min**	**110 °C 20 min**	**130 °C 10 min**	**130 °C 15 min**	**130 °C 20 min**
Teplota [C]	90	90	90	110	110	110	130	130	130
Čas jednoho cyklu [min]	10	15	20	10	15	20	10	15	20
Navážka [g]	0,5054	0,506	0,5019	0,5048	0,5022	0,5039	0,5026	0,5031	0,503
Název analytu	**Koncentrace [ng/ml]**								
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,70	0,68	0,68	0,68	0,66	0,65	0,67	0,67	0,68
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,57	0,53	0,52	0,47	0,56	0,50	0,50	0,49	0,53
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
3 – methylcholanthren	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	9,06	9,43	11,41	10,56	10,98
Acenaften	7,54	4,80	5,67	11,43	4,52	7,69	11,88	8,43	10,13
Acenaftylen	7,04	6,78	10,08	13,26	<LOQ	12,60	15,22	13,34	15,37
Akridin	8,08	9,26	6,90	9,46	7,12	8,01	10,96	10,10	10,89
Antracen	69,34	69,20	66,14	78,81	59,23	63,63	75,20	86,71	79,39
Benzo[a]antracen	80,35	139,79	70,28	84,78	48,55	59,98	73,26	89,79	70,54
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	23,39	28,38	23,15	29,92	23,61	23,66	28,38	29,33	26,77
Benzo[a]pyren	84,11	162,50	58,86	74,49	45,69	69,77	76,87	86,37	65,15
Benzo[b]fluoranten	73,20	119,26	62,63	74,37	51,19	71,09	67,71	90,74	63,44
Benzo[ghi]perylen	53,28	136,90	42,49	53,43	38,78	56,63	52,72	77,92	55,83
Benzo[k]fluoranten	20,85	73,19	15,35	19,59	12,50	16,06	17,14	22,76	13,32
Benzo[b]thiofen	1,25	1,37	2,35	1,39	2,56	14,17	30,20	24,43	19,67
Benzo[e]pyren	61,11	86,57	44,26	54,39	41,66	52,90	61,97	72,66	58,00
Benzofuran	1,84	2,22	3,77	0,30	5,03	52,11	212,76	165,08	98,41
Bifenyl	82,42	58,31	79,60	189,26	90,70	256,44	400,27	343,48	337,15
Karbazol	201,95	185,76	158,11	177,73	146,44	150,79	184,93	167,29	170,69
Chrysen	77,03	246,07	70,26	79,43	50,51	56,09	66,99	82,17	65,84
Dibenzo[a,h]antracen	11,65	54,24	9,77	14,22	9,25	12,98	12,49	21,56	12,92
Dibenzofuran	101,75	81,05	79,17	159,16	92,18	141,00	190,58	177,41	185,73
Dibenzothiofen	11,12	10,76	9,59	9,53	8,98	9,86	10,06	10,71	11,05
Fluoranten	142,11	132,86	126,79	133,87	105,85	113,59	136,22	143,85	145,52
Fluoren	37,87	30,39	27,89	41,48	26,45	33,73	43,89	36,38	39,93
Indan	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	3,01	14,06	8,14	6,51
Inden	<LOQ	0,18	<LOQ	<LOQ	<LOQ	0,46	1,99	1,89	1,04
Indeno(1,2,3-cd)pyren	57,90	148,87	43,45	60,61	37,41	64,19	53,88	84,56	51,78
Indol	9,05	5,27	5,63	9,99	10,41	15,19	18,92	17,56	17,26
Isochinolin	17,38	13,12	15,11	31,85	26,15	46,29	61,84	57,79	54,85
Naftalen	22,15	25,31	49,02	20,56	51,43	318,93	710,40	584,74	487,53
1 – methylnaftalen	24,66	23,22	37,20	60,91	36,46	135,88	247,24	181,04	188,65
2,3,6 – trimethylnaftalen	16,79	13,36	13,51	20,36	10,40	15,09	21,05	15,15	18,81
2,6 – dimethylnaftalen	36,77	27,36	34,94	72,75	31,40	77,26	127,13	93,19	106,14
2 – methylnaftalen	22,12	20,25	32,71	55,67	34,41	149,08	270,20	212,44	212,28
Perylen	11,74	25,79	8,35	10,91	6,47	11,88	9,60	11,56	12,12
Fenantren	290,42	280,79	279,16	327,15	239,34	273,62	315,31	355,83	341,04
1-methylfenantren	56,44	53,52	47,44	56,20	42,32	44,60	59,56	53,65	56,34
Fenantridin	13,62	13,36	11,04	14,48	11,94	12,61	16,59	17,12	17,03
Pyren	134,37	145,07	126,61	136,31	111,22	114,28	142,13	152,19	145,03
Chinolin	44,67	35,82	43,08	97,29	78,24	153,44	209,84	198,80	186,65
Acenaften-D10	28,43	22,60	24,74	43,61	32,89	47,99	64,22	60,88	57,34
Chrysen-D12	107,26	107,07	99,33	109,34	80,57	71,74	106,30	145,26	84,23
Naftalen-D8	0,97	1,11	2,10	0,64	3,52	20,15	43,66	38,77	30,09
Perylen-D12	160,72	155,25	148,17	168,96	125,03	118,07	175,96	232,20	134,96
Fenantren-D10	65,44	64,02	62,43	67,08	62,37	56,47	62,20	71,96	61,77

Tabulka 17: Koncentrace jednotlivých analytů při srovnání DCM a Toluenu pro PSE extrakci

Analyt	DCM		TOL	
	Průměr [ng/ml]	Smodch [ng/ml]	Průměr [ng/ml]	Smodch [ng/ml]
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	↑ 0,45	0,39	↓ 0,29	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	↑ 0,59	0,01	↓ 0,35	0,04
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	↑ 0,26	0,11	↓ 0,20	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	↓ 0,20	0,34	↑ 0,23	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	↓ 0,21	0,21	↑ 0,49	0,04
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	↓ 0,19	0,32	↑ 0,24	0,04
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	↓ <LOQ	0,00	↑ 0,29	0,01
3 – methylcholanthren	↑ 10,65	1,03	↓ 8,14	1,77
Acenaften	↑ 12,81	1,63	↓ 10,85	2,94
Acenaftylen	↑ 20,16	5,45	↓ 18,79	6,99
Akridin	↑ 13,98	2,55	↓ 8,45	0,30
Antracen	↑ 100,04	12,87	↓ 90,55	8,73
Benzo[a]antracen	↑ 107,51	20,11	↓ 85,73	9,56
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	↑ 43,14	8,65	↓ 25,24	2,61
Benzo[a]pyren	↑ 101,70	22,31	↓ 56,44	6,42
Benzo[b]fluoranten	↑ 97,83	20,80	↓ 91,43	8,39
Benzo[ghi]perylen	↓ 86,85	17,39	↑ 90,78	12,16
Benzo[k]fluoranten	↑ 51,20	11,03	↓ 37,19	5,37
Benzo[b]thiofen	↑ 37,87	7,83	↓ 13,58	10,06
Benzo[e]pyren	↑ 82,09	12,34	↓ 43,13	5,82
Benzofuran	↑ 342,87	126,54	↓ 45,01	38,63
Bifenyl	↑ 471,21	75,67	↓ 268,42	93,41
Karbazol	↑ 232,57	31,09	↓ 169,35	16,53
Chrysen	↑ 100,19	19,02	↓ 85,33	8,42
Dibenzo[a,h]antracen	↓ 15,42	3,98	↑ 37,38	3,33
Dibenzofuran	↑ 221,03	25,08	↓ 186,65	36,23
Dibenzothiofen	↓ 8,58	0,78	↑ 9,34	1,42
Fluoranten	↑ 187,42	39,05	↓ 165,33	16,92
Fluoren	↑ 48,68	6,26	↓ 31,99	3,46
Indan	↑ 23,86	9,23	↓ 5,66	4,97
Inden	↑ 2,82	0,81	↓ 0,95	0,49
Indeno(1,2,3-cd)pyren	↓ 64,09	12,23	↑ 104,34	9,37
Indol	↑ 17,32	1,38	↓ 11,96	0,32
Isochinolin	↑ 70,60	7,56	↓ 63,87	7,77
Naftalen	↑ 980,20	204,50	↓ 333,47	267,17
1 – methylnaftalen	↑ 273,50	58,93	↓ 124,20	62,56
2,3,6 – trimethylnaftalen	↑ 16,48	2,11	↓ 12,53	2,11
2,6 – dimethylnaftalen	↑ 51,96	7,02	↓ 49,56	13,77
2 – methylnaftalen	↑ 1374,65	252,22	↓ 579,35	302,80
Perylen	↓ 13,83	2,52	↑ 31,47	0,69
Fenantren	↑ 410,99	73,08	↓ 374,61	38,22
1-methylfenantren	↑ 66,62	10,25	↓ 49,29	3,38
Fenantridin	↑ 22,49	4,05	↓ 15,08	1,01
Pyren	↑ 194,58	30,28	↓ 160,49	8,30
Chinolin	↑ 244,16	30,63	↓ 106,87	31,83
Acenaften-D10	↑ 66,28	6,48	↓ 56,49	13,96
Chrysen-D12	↓ 109,45	9,76	↑ 168,07	32,01
Naftalen-D8	↑ 58,94	11,41	↓ 22,14	18,45
Perylen-D12	↓ 192,89	12,53	↑ 313,13	67,35
Fenantren-D12	↓ 72,05	7,53	↑ 78,33	16,18

Tabulka 18: Koncentrace jednotlivých analytů v optimalizaci termální desorpce

T 300 °C	Vzorek 1	Vzorek 2	Vzorek 3	Vzorek 4	Vzorek 5	Vzorek 6	Vzorek 7	Vzorek 8	Vzorek 9
Průtok N2 [ml/min]	100	100	100	300	300	300	500	500	500
t [min]	10	20	30	10	20	30	10	20	30
m [g]	0,5005	0,5045	0,5027	0,5021	0,5016	0,5043	0,5029	0,5006	0,5021
Název analytu	**Koncetrance [ng/ml]**								
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,65	0,63	0,65	0,64	0,71	0,63	0,64	0,63	0,80
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	0,58	<LOQ	0,52	<LOQ	0,50
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl 2,2',3,4,4',5,5'-heptachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	0,45	<LOQ	<LOQ	<LOQ	0,88
3 – methylcholanthren	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Acenaften	12,80	6,17	9,13	4,32	14,59	25,17	19,75	32,57	22,27
Acenaftylen	9,28	6,48	6,90	5,15	11,49	20,05	14,43	23,27	17,79
Akridin	8,13	3,69	5,07	4,06	3,31	8,38	7,90	11,46	6,04
Antracen	8,67	5,13	10,57	9,09	21,33	27,50	30,06	37,08	34,07
Benzo[a]antracen	6,67	3,66	12,09	7,25	10,14	9,36	12,84	16,99	14,86
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Benzo[a]pyren	10,04	9,41	11,32	10,11	10,34	9,77	10,51	11,97	12,01
Benzo[b]fluoranten	4,53	2,79	7,07	4,73	3,70	2,56	4,38	6,09	5,19
Benzo[ghi]perylen	4,05	2,58	5,32	3,35	3,57	2,58	3,26	3,24	3,24
Benzo[k]fluoranten	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Benzo[b]thiofen	18,34	12,03	15,16	6,76	16,77	63,68	62,06	94,00	37,13
Benzo[e]pyren	4,56	2,16	5,71	3,85	3,61	3,35	4,15	5,58	5,46
Benzofuran	1198,30	721,14	689,28	387,24	150,24	960,80	1011,07	1594,90	107,76
Bifenyl	54,07	40,58	55,15	31,23	279,08	467,02	251,90	399,87	338,98
Karbazol	60,14	34,38	53,05	31,97	32,25	38,58	60,96	88,29	67,10
Chrysen	7,50	3,92	10,35	7,33	10,34	10,38	12,13	17,70	15,32
Dibenzo[a,h]antracen	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Dibenzofuran	21,04	13,95	16,88	12,14	66,19	110,49	66,09	98,58	96,69
Dibenzothiofen	<LOQ	<LOQ	7,65	6,50	8,25	8,31	8,76	9,02	8,15
Fluoranten	13,02	8,41	19,35	15,35	28,76	26,98	35,50	43,79	37,15
Fluoren	41,77	20,25	31,05	17,91	65,99	122,29	84,64	146,35	119,36
Indan	531,41	196,41	187,96	72,17	30,00	221,81	264,88	460,52	15,37
Inden	1396,36	528,55	550,81	203,70	81,07	546,50	752,85	1264,72	88,76
Indeno(1,2,3-cd)pyren	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Indol	954,52	741,91	923,86	786,09	712,47	1884,86	1773,10	2436,31	2942,42
Isochinolin	129,12	74,88	98,51	46,17	86,57	214,93	173,02	262,12	167,93
Naftalen	309,32	211,72	249,32	139,98	256,15	940,11	837,24	1263,07	522,25
1 – methylnaftalen	143,62	76,09	100,69	45,49	162,66	402,17	320,75	547,75	315,84
2,3,6 – trimethylnaftalen	13,16	4,75	7,31	2,89	25,94	44,43	30,77	51,16	39,13
2,6 – dimethylnaftalen	66,22	32,65	45,68	19,52	113,47	188,35	144,39	234,15	154,31
2 – methylnaftalen	129,36	68,71	91,86	36,22	166,51	405,21	337,10	577,33	308,92
Perylen	1,43	1,03	1,59	1,11	0,78	0,69	0,74	1,03	1,20
Fenantren	34,51	28,23	66,38	54,13	114,73	125,56	130,03	157,60	147,28
1-methylfenantren	8,36	4,68	16,44	11,33	21,72	20,12	25,07	32,13	26,26
Fenantridin	4,44	2,73	3,65	2,54	3,58	4,06	5,96	8,58	5,79
Pyren	15,66	9,39	29,79	23,98	40,25	35,10	43,48	54,29	48,79
Chinolin	74,16	48,61	16,88	45,98	130,58	304,70	216,11	308,29	242,41

Tabulka 19: Koncentrace jednotlivých analytů při optimalizaci teploty u termální desorpce

Teplota [°C]	300	400	500
Průtok N2 [ml/min]	500	500	500
t [min]	20	20	20
m [g]	0,5005	0,5045	0,5027
Název analytu	**Koncentrace [ng/ml]**		
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	<LOQ	<LOQ	<LOQ
3 – methylcholanthren	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Acenaften	34,69	127,74	172,11
Acenaftylen	23,85	89,02	185,27
Akridin	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Antracen	38,45	115,25	180,65
Benzo[a]antracen	16,63	37,78	52,47
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Benzo[a]pyren	3,83	17,37	22,81
Benzo[b]fluoranten	4,91	15,15	16,70
Benzo[ghi]perylen	3,10	6,04	7,12
Benzo[k]fluoranten	2,02	6,22	7,51
Benzo[b]thiofen	89,54	171,41	365,87
Benzo[e]pyren	3,47	11,23	14,23
Benzofuran	1594,08	4318,33	8504,10
Bifenyl	406,40	637,73	1186,67
Karbazol	78,51	181,29	193,85
Chrysen	13,86	32,06	41,85
Dibenzo[a,h]antracen	<LOQ	<LOQ	<LOQ
Dibenzofuran	100,43	224,42	605,58
Dibenzothiofen	4,40	6,94	10,27
Fluoranten	41,40	85,97	116,54
Fluoren	138,17	507,17	753,22
Indan	461,14	2526,74	3931,94
Inden	1247,83	7118,13	12786,00
Indeno(1,2,3-cd)pyren	1,90	4,48	6,19
Indol	2440,58	4173,63	4451,37
Isochinolin	190,89	276,68	515,53
Naftalen	1322,20	4184,47	14087,01
1 – methylnaftalen	569,36	2161,99	3728,15
2,3,6 – trimethylnaftalen	51,15	110,57	127,16
2,6 – dimethylnaftalen	236,50	819,56	1399,38
2 – methylnaftalen	624,80	2443,34	6109,20
Perylen	1,47	2,36	3,28
Fenantren	166,78	315,79	477,05
1-methylfenantren	29,92	85,56	98,41
Fenantridin	6,83	21,83	29,27
Pyren	50,49	111,64	129,46
Chinolin	287,87	613,96	1256,77
Acenaften-D10	11,85	13,36	14,91
Chrysen-D12	6,09	7,95	6,49
Naftalen-D8	33,37	36,06	38,79
Perylen-D12	3,28	3,53	3,35
Fenantren-D10	5,65	7,70	6,27

Tabulka 20: Koncentrace jednotlivých analytů v opakovaných optimálních extrakcích

Analyt	PSE		Term	
	Průměr [ng/ml]	Smodch [ng/ml]	Průměr [ng/ml]	Smodch [ng/ml]
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,45	0,39	<LOQ	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,59	0,01	<LOQ	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,26	0,11	<LOQ	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,20	0,34	<LOQ	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,21	0,21	<LOQ	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,19	0,32	<LOQ	0,00
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
3 – methylcholanthren	10,65	1,03	<LOQ	0,00
Acenaften	12,81	1,63	181,15	2,64
Acenaftylen	20,16	5,45	199,26	7,59
Akridin	13,98	2,55	59,35	21,14
Antracen	100,04	12,87	280,28	75,32
Benzo[a]antracen	107,51	20,11	98,90	28,84
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	43,14	8,65	<LOQ	0,00
Benzo[a]pyren	101,70	22,31	52,80	28,06
Benzo[b]fluoranten	97,83	20,80	51,45	21,66
Benzo[ghi]perylen	86,85	17,39	19,72	8,08
Benzo[k]fluoranten	51,20	11,03	28,86	9,65
Benzo[b]thiofen	37,87	7,83	362,31	21,89
Benzo[e]pyren	82,09	12,34	33,79	15,30
Benzofuran	342,87	126,54	7915,55	859,41
Bifenyl	471,21	75,67	1206,14	29,47
Karbazol	232,57	31,09	355,15	103,95
Chrysen	100,19	19,02	75,63	22,76
Dibenzo[a,h]antracen	15,42	3,98	<LOQ	0,00
Dibenzofuran	221,03	25,08	662,33	51,42
Dibenzothiofen	8,58	0,78	15,56	4,98
Fluoranten	187,42	39,05	183,33	47,15
Fluoren	48,68	6,26	956,02	126,25
Indan	23,86	9,23	3589,68	431,67
Inden	2,82	0,81	12164,50	1296,12
Indeno(1,2,3-cd)pyren	64,09	12,23	16,50	6,53
Indol	17,32	1,38	6042,92	964,77
Isochinolin	70,60	7,56	686,91	68,39
Naftalen	980,20	204,50	13726,05	919,69
1 – methylnaftalen	273,50	58,93	3972,11	389,72
2,3,6 – trimethylnaftalen	16,48	2,11	102,91	6,70
2,6 – dimethylnaftalen	51,96	7,02	500,77	34,52
2 – methylnaftalen	1374,65	252,22	23399,19	1976,74
Perylen	13,83	2,52	6,27	2,03
Fenantren	410,99	73,08	653,34	156,93
1-methylfenantren	66,62	10,25	148,11	31,12
Fenantridin	22,49	4,05	55,33	14,88
Pyren	194,58	30,28	204,56	54,54
Chinolin	244,16	30,63	1350,59	48,38
Acenaften-D10	66,28	6,48	16,73	0,99
Chrysen-D12	109,45	9,76	11,99	5,07
Naftalen-D8	58,94	11,41	46,38	3,06
Perylen-D12	192,89	12,53	8,89	4,56
Fenantren-D10	72,05	7,53	9,17	3,06

Tabulka 21: Koncentrace jednotlivých analytů v PSE extraktech z původních biouhlů

Analyt	Sonnenerde		Novoterra	
	Průměr [ng/g]	Smodch [ng/g]	Průměr [ng/g]	Smodch [ng/g]
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,43	0,04	0,41	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,46	0,05	0,43	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,37	0,06	0,34	0,03
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,40	0,04	0,38	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,70	0,20	0,51	0,15
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,40	0,07	0,38	0,02
1,1'-Bifenyl 2,2',3,4,4',5,5'-heptachloro-	0,44	0,03	0,42	0,01
3 – methylcholanthren	3,87	0,04	3,95	0,02
Acenaften	5,83	3,17	6,10	0,89
Acenaftylen	25,80	16,40	13,79	1,48
Akridin	5,26	1,05	4,76	0,21
Antracen	34,52	13,26	27,07	1,31
Benzo[a]antracen	17,22	5,52	27,03	14,61
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	8,55	0,16	9,42	0,17
Benzo[a]pyren	3,26	4,61	11,43	5,47
Benzo[b]fluoranten	15,06	3,81	53,96	51,43
Benzo[ghi]perylen	0,00	0,00	9,85	13,94
Benzo[k]fluoranten	8,20	1,43	19,94	14,86
Benzo[b]thiofen	2,36	2,77	2,60	0,21
Benzo[e]pyren	4,26	6,03	9,15	0,21
Benzofuran	57,21	80,91	352,53	65,69
Bifenyl	61,56	49,80	95,21	10,35
Karbazol	21,01	7,70	17,90	1,93
Chrysen	18,82	6,09	33,58	22,53
Dibenzo[a,h]antracen	0,00	0,00	7,74	10,95
Dibenzofuran	59,93	37,53	94,49	9,44
Dibenzothiofen	3,22	1,22	2,31	0,82
Fluoranten	92,67	22,89	50,20	9,73
Fluoren	16,27	7,95	23,39	2,84
Indan	6,04	8,54	31,00	4,48
Inden	2,80	3,96	6,04	0,91
Indeno(1,2,3-cd)pyren	2,90	4,10	13,90	10,43
Indol	2,52	1,85	3,39	0,61
Isochinolin	18,92	11,31	21,74	2,55
Naftalen	378,54	11,22	368,25	53,92
1 – methylnaftalen	36,61	34,68	58,24	8,89
2,3,6 – trimethylnaftalen	1,61	0,75	4,20	0,37
2,6 – dimethylnaftalen	10,82	7,60	23,58	2,48
2 – methylnaftalen	316,30	39,49	511,30	57,43
Perylen	47,51	0,18	47,88	0,37
Fenantren	176,52	57,49	124,56	17,08
1-methylfenantren	16,64	5,22	37,45	3,40
Fenantridin	6,36	1,23	5,09	0,54
Pyren	77,51	14,80	75,67	3,45
Chinolin	36,19	27,51	32,19	4,48

Tabulka 22: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Sonnenerde a půdy TA ČR

Analyt	TA ČR [ng/g]							
	Sonne původní	Smodch	Sonne po	Smodch	Půda původní	Smodch	Půda po	Smodch
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,43	0,04	0,46	0,01	0,70	0,41	0,40	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,46	0,05	0,51	0,04	0,74	0,44	0,40	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,37	0,06	0,38	0,03	0,31	0,00	0,30	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,40	0,04	0,39	0,00	0,67	0,42	0,37	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,70	0,20	0,82	0,17	0,39	0,07	0,36	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,40	0,07	0,41	0,02	0,44	0,13	0,34	0,00
1,1'-Bifenyl 2,2',3,4,4',5,5'-heptachloro-	0,44	0,03	0,44	0,02	0,66	0,36	0,40	0,02
3 – methylcholanthren	3,87	0,04	33,14	39,82	3,97	0,11	4,17	0,01
Acenaften	5,83	3,17	12,32	1,70	0,77	0,05	0,92	0,27
Acenaftylen	25,80	16,40	42,55	2,96	2,01	0,21	2,49	1,23
Akridin	5,26	1,05	4,70	1,87	2,91	0,05	2,94	0,18
Antracen	34,52	13,26	38,78	3,73	3,05	0,55	2,19	0,72
Benzo[a]antracen	17,22	5,52	56,49	57,52	17,94	7,35	12,99	4,91
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	8,55	0,16	10,87	3,28	8,70	0,01	8,45	0,07
Benzo[a]pyren	6,47	0,07	9,20	1,26	13,09	5,34	10,24	2,54
Benzo[b]fluoranten	15,06	3,81	193,80	18,48	32,10	12,09	25,29	9,27
Benzo[ghi]perylen	<LOQ	0,00	48,27	68,27	22,46	8,50	17,64	3,85
Benzo[k]fluoranten	8,82	0,55	36,50	40,10	17,99	6,41	14,59	3,49
Benzo[b]thiofen	2,36	2,77	3,69	0,27	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Benzo[e]pyren	7,87	0,93	39,62	4,90	17,10	0,61	10,67	1,82
Benzofuran	57,21	80,91	105,37	0,06	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Bifenyl	101,00	5,98	101,04	12,07	0,54	0,77	2,17	1,70
Karbazol	21,01	7,70	20,29	2,19	3,82	0,33	3,69	0,08
Chrysen	18,82	6,09	31,72	21,89	18,48	6,25	14,96	6,90
Dibenzo[a,h]antracen	<LOQ	0,00	284,09	15,25	8,17	2,87	3,38	4,79
Dibenzofuran	59,93	37,53	73,08	9,56	1,62	1,07	2,48	1,72
Dibenzothiofen	3,22	1,22	4,36	2,26	1,10	0,44	0,81	0,16
Fluoranten	92,67	22,89	111,45	19,27	40,56	9,79	26,89	11,80
Fluoren	16,27	7,95	37,49	3,69	0,86	1,21	1,87	0,85
Indan	6,04	8,54	17,06	0,52	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Inden	2,80	3,96	7,57	0,28	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Indeno(1,2,3-cd)pyren	2,90	4,10	184,61	11,94	21,96	11,23	15,76	4,79
Indol	2,52	1,85	3,61	0,07	0,79	1,11	1,49	0,32
Isochinolin	18,92	11,31	19,46	4,37	5,31	1,04	6,40	1,74
Naftalen	378,54	11,22	381,80	8,53	1,52	0,03	4,86	0,99
1 – methylnaftalen	36,61	34,68	126,35	4,81	1,37	0,14	2,28	1,05
2,3,6 – trimethylnaftalen	1,61	0,75	2,57	0,39	0,19	0,27	0,19	0,27
2,6 – dimethylnaftalen	10,82	7,60	29,00	2,91	0,45	0,63	1,31	0,58
2 – methylnaftalen	316,30	39,49	1087,13	34,98	3,08	0,68	12,27	8,78
Perylen	47,51	0,18	61,57	0,75	49,62	0,72	49,43	1,92
Fenantren	176,52	57,49	203,32	34,15	18,82	7,90	12,53	6,12
1-methylfenantren	16,64	5,22	23,35	7,77	3,34	0,14	2,09	0,80
Fenantridin	6,36	1,23	8,82	1,60	2,93	0,08	2,83	0,03
Pyren	77,51	14,80	87,14	18,45	35,33	1,77	26,46	9,74
Chinolin	36,19	27,51	23,68	1,33	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00

Tabulka 23: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Sonnenerde a černozemě

Analyt	Černozem [ng/g]							
	Sonne původní	Smodch	Sonne po	Smodch	Půda původní	Smodch	Půda po	Smodch
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,43	0,04	0,45	0,02	0,74	0,32	0,42	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,46	0,05	0,50	0,03	1,01	0,67	0,45	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,37	0,06	0,35	0,01	0,36	0,02	0,33	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,40	0,04	0,38	0,01	0,42	0,03	0,39	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,70	0,20	0,56	0,17	0,58	0,03	0,49	0,08
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,40	0,07	0,40	0,01	0,49	0,12	0,36	0,01
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,44	0,03	0,44	0,03	1,04	0,75	0,42	0,01
3 – methylcholanthren	3,87	0,04	3,95	0,07	4,40	0,24	4,51	0,14
Acenaften	5,83	3,17	7,22	3,85	1,36	0,18	1,25	0,07
Acenaftylen	25,80	16,40	13,16	9,39	2,98	0,70	2,52	0,61
Akridin	5,26	1,05	3,47	0,45	3,28	0,28	3,72	1,21
Antracen	34,52	13,26	29,14	2,18	5,20	2,20	4,72	2,96
Benzo[a]antracen	17,22	5,52	19,60	0,80	8,21	0,69	8,49	0,10
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	8,55	0,16	9,18	0,18	8,91	0,34	8,62	0,13
Benzo[a]pyren	3,26	4,61	7,31	0,74	7,12	0,51	7,30	0,17
Benzo[b]fluoranten	15,06	3,81	21,77	0,94	11,30	1,76	12,36	1,90
Benzo[ghi]perylen	<LOQ	0,00	5,44	7,69	13,13	2,13	12,16	0,97
Benzo[k]fluoranten	8,20	1,43	10,75	0,43	8,44	0,96	8,73	0,78
Benzo[b]thiofen	2,36	2,77	1,59	1,81	0,31	0,01	0,16	0,23
Benzo[e]pyren	7,87	0,93	10,30	0,86	5,55	0,51	5,89	0,98
Benzofuran	57,21	80,91	174,82	243,18	<LOQ	0,00	1,85	0,24
Bifenyl	101,00	5,98	110,10	3,68	3,19	1,10	4,30	2,16
Karbazol	21,01	7,70	16,87	1,55	5,43	0,25	3,94	0,46
Chrysen	18,82	6,09	21,45	3,67	10,41	0,85	9,63	0,46
Dibenzo[a,h]antracen	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	10,50	3,46	3,61	5,10
Dibenzofuran	59,93	37,53	77,09	43,64	4,08	1,24	4,26	1,44
Dibenzothiofen	3,22	1,22	2,24	0,37	1,74	0,19	1,20	0,34
Fluoranten	92,67	22,89	74,66	21,52	34,64	1,83	24,53	6,23
Fluoren	16,27	7,95	23,40	9,43	3,12	1,74	2,93	1,12
Indan	6,04	8,54	14,76	20,87	3,24	1,03	3,04	0,09
Inden	2,80	3,96	3,74	5,29	<LOQ	0,00	0,57	0,80
Indeno(1,2,3-cd)pyren	2,90	4,10	3,31	4,68	10,55	2,31	9,98	0,29
Indol	2,52	1,85	2,24	1,00	2,05	0,15	0,83	1,18
Isochinolin	18,92	11,31	10,94	4,93	11,94	0,44	8,80	1,62
Naftalen	378,54	11,22	231,70	274,95	7,92	1,84	9,05	3,58
1 – methylnaftalen	36,61	34,68	71,64	23,79	2,95	0,74	3,49	1,02
2,3,6 – trimethylnaftalen	1,61	0,75	3,64	1,21	0,78	0,20	0,56	0,10
2,6 – dimethylnaftalen	10,82	7,60	30,08	3,68	2,39	0,53	2,15	0,33
2 – methylnaftalen	316,30	39,49	912,05	106,13	13,68	4,05	19,87	6,12
Perylen	47,51	0,18	48,10	0,23	48,67	0,83	49,25	1,27
Fenantren	176,52	57,49	138,64	8,77	41,51	6,05	24,75	15,27
1-methylfenantren	16,64	5,22	35,77	2,47	3,92	1,81	3,11	1,19
Fenantridin	6,36	1,23	3,86	0,02	3,51	0,24	3,13	0,17
Pyren	77,51	14,80	89,20	10,56	33,93	0,20	24,21	3,02
Chinolin	36,19	27,51	5,30	1,98	3,01	1,04	1,04	1,47

Tabulka 24: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Sonnenerde a kambizemě

Analyt	Kambizem [ng/g]							
	Sonne původní	Smodch	Sonne po	Smodch	Půda původní	Smodch	Půda po	Smodch
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,43	0,04	0,63	0,08	0,74	0,07	0,65	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,46	0,05	0,83	0,11	0,86	0,06	0,74	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,37	0,06	0,40	0,00	0,38	0,01	0,33	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,40	0,04	0,42	0,02	0,51	0,00	0,43	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,70	0,20	0,79	0,02	0,72	0,21	0,51	0,03
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,40	0,07	0,49	0,02	0,47	0,02	0,42	0,02
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,44	0,03	0,55	0,09	0,70	0,03	0,63	0,02
3 – methylcholanthren	3,87	0,04	4,11	0,13	4,58	0,01	5,64	1,39
Acenaften	5,83	3,17	10,85	0,08	2,50	1,46	4,29	1,77
Acenaftylen	25,80	16,40	39,74	0,58	5,18	1,86	6,89	1,24
Akridin	5,26	1,05	3,31	0,12	3,09	0,14	3,10	0,18
Antracen	34,52	13,26	37,46	5,02	11,80	1,67	12,94	1,28
Benzo[a]antracen	17,22	5,52	12,55	1,57	68,04	2,70	95,16	2,16
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	8,55	0,16	8,50	0,02	11,52	0,27	11,65	2,36
Benzo[a]pyren	3,26	4,61	<LOQ	0,00	68,98	8,02	101,72	16,51
Benzo[b]fluoranten	15,06	3,81	12,45	1,23	143,24	7,14	206,58	25,54
Benzo[ghi]perylen	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	229,11	137,82	361,92	267,18
Benzo[k]fluoranten	8,20	1,43	7,07	0,63	71,52	3,47	86,06	11,59
Benzo[b]thiofen	2,36	2,77	3,85	0,96	0,20	0,28	0,49	0,22
Benzo[e]pyren	7,87	0,93	5,81	0,92	95,58	12,27	151,13	8,01
Benzofuran	57,21	80,91	109,50	40,71	<LOQ	0,00	0,77	1,09
Bifenyl	101,00	5,98	111,04	8,37	5,44	5,61	11,10	2,77
Karbazol	21,01	7,70	14,11	1,90	9,49	0,75	12,80	7,45
Chrysen	18,82	6,09	13,23	1,22	78,37	9,41	98,93	13,51
Dibenzo[a,h]antracen	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	36,57	9,04	58,19	24,08
Dibenzofuran	59,93	37,53	76,62	5,54	6,17	3,50	13,17	7,13
Dibenzothiofen	3,22	1,22	3,70	0,05	5,25	0,81	7,34	2,60
Fluoranten	92,67	22,89	91,67	8,68	139,04	18,18	145,56	3,63
Fluoren	16,27	7,95	34,11	0,03	4,55	1,44	6,08	1,41
Indan	6,04	8,54	19,69	7,73	<LOQ	0,00	1,71	2,41
Inden	2,80	3,96	5,15	1,93	1,64	0,06	1,95	0,38
Indeno(1,2,3-cd)pyren	2,90	4,10	<LOQ	0,00	107,24	20,65	171,91	49,90
Indol	2,52	1,85	2,33	0,16	2,04	0,64	1,88	0,20
Isochinolin	18,92	11,31	17,43	1,10	16,58	11,95	15,15	3,15
Naftalen	378,54	11,22	405,60	113,06	7,27	7,83	16,71	12,22
1 – methylnaftalen	36,61	34,68	136,41	15,11	4,29	4,09	12,18	6,67
2,3,6 – trimethylnaftalen	1,61	0,75	2,66	0,07	1,91	0,76	2,80	1,18
2,6 – dimethylnaftalen	10,82	7,60	30,93	0,62	4,21	4,06	12,17	6,49
2 – methylnaftalen	316,30	39,49	1134,66	142,53	25,81	30,45	93,03	59,03
Perylen	47,51	0,18	47,46	0,04	59,81	1,34	66,71	1,10
Fenantren	176,52	57,49	201,12	18,85	75,74	9,54	82,31	29,85
1-methylfenantren	16,64	5,22	19,64	0,76	14,14	2,69	17,26	6,72
Fenantridin	6,36	1,23	4,27	0,27	3,41	0,03	3,32	0,16
Pyren	77,51	14,80	72,72	5,63	151,20	11,56	166,91	43,61
Chinolin	36,19	27,51	9,13	0,89	0,96	1,36	1,82	0,16

Tabulka 25: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Sonnenerde a fluvizemě

Analyt	Fluvizem [ng/g]							
	Sonne původní	Smodch	Sonne po	Smodch	Půda původní	Smodch	Půda po	Smodch
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,43	0,04	0,46	0,03	0,46	0,01	0,44	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,46	0,05	0,54	0,06	0,48	0,01	0,47	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,37	0,06	0,39	0,02	0,32	0,02	0,48	0,21
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,40	0,04	0,39	0,01	0,39	0,00	0,42	0,04
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,70	0,20	0,89	0,23	0,44	0,08	1,32	0,97
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,40	0,07	0,40	0,01	0,36	0,01	0,38	0,04
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,44	0,03	0,48	0,07	0,47	0,00	0,43	0,00
3 – methylcholanthren	3,87	0,04	3,94	0,08	4,65	0,16	4,45	0,48
Acenaften	5,83	3,17	10,22	3,52	5,06	4,62	1,45	0,58
Acenaftylen	25,80	16,40	38,96	15,02	2,87	0,50	2,32	0,85
Akridin	5,26	1,05	3,20	0,00	3,10	0,05	2,83	0,07
Antracen	34,52	13,26	46,02	3,31	16,09	15,86	4,23	0,32
Benzo[a]antracen	17,22	5,52	13,85	0,57	81,32	71,47	36,82	9,74
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	8,55	0,16	8,51	0,06	9,45	0,29	9,10	0,66
Benzo[a]pyren	3,26	4,61	<LOQ	0,00	92,18	9,65	33,66	15,82
Benzo[b]fluoranten	15,06	3,81	11,13	0,73	135,68	82,93	58,91	18,21
Benzo[ghi]perylen	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	79,07	34,70	50,65	16,56
Benzo[k]fluoranten	8,20	1,43	6,65	0,07	66,81	40,22	29,75	10,23
Benzo[b]thiofen	2,36	2,77	2,49	2,41	0,32	0,01	<LOQ	0,00
Benzo[e]pyren	7,87	0,93	5,17	0,06	71,19	9,83	44,45	2,18
Benzofuran	57,21	80,91	59,27	74,58	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Bifenyl	101,00	5,98	85,02	48,24	3,41	0,78	2,68	1,99
Karbazol	21,01	7,70	17,63	0,60	6,75	1,82	4,34	0,23
Chrysen	18,82	6,09	14,14	0,04	70,78	45,63	36,82	16,24
Dibenzo[a,h]antracen	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	28,92	15,24	15,96	6,27
Dibenzofuran	59,93	37,53	81,13	15,28	4,93	1,61	3,78	1,95
Dibenzothiofen	3,22	1,22	3,19	0,62	2,66	0,67	1,76	0,21
Fluoranten	92,67	22,89	109,00	12,20	238,67	42,98	67,77	8,06
Fluoren	16,27	7,95	36,17	4,39	5,80	3,53	3,05	1,43
Indan	6,04	8,54	10,16	14,37	1,44	2,04	<LOQ	0,00
Inden	2,80	3,96	3,67	3,75	1,29	0,28	<LOQ	0,00
Indeno(1,2,3-cd)pyren	2,90	4,10	<LOQ	0,00	86,26	47,00	39,32	14,99
Indol	2,52	1,85	2,21	0,68	1,67	0,15	0,59	0,84
Isochinolin	18,92	11,31	12,68	8,30	15,57	4,01	7,63	3,26
Naftalen	378,54	11,22	239,31	259,12	6,27	0,30	2,35	3,33
1 – methylnaftalen	36,61	34,68	34,98	0,22	2,92	0,31	2,55	1,54
2,3,6 – trimethylnaftalen	1,61	0,75	2,50	0,40	1,17	0,32	0,69	0,30
2,6 – dimethylnaftalen	10,82	7,60	29,09	4,33	2,68	0,68	1,85	1,09
2 – methylnaftalen	316,30	39,49	337,10	80,61	12,91	1,21	11,68	10,08
Perylen	47,51	0,18	47,39	0,13	62,23	12,82	53,79	2,73
Fenantren	176,52	57,49	234,68	16,51	67,76	48,01	31,90	12,54
1-methylfenantren	16,64	5,22	22,86	0,06	8,02	5,58	3,32	0,40
Fenantridin	6,36	1,23	3,95	0,02	3,45	0,27	2,98	0,02
Pyren	77,51	14,80	81,18	6,25	197,85	38,15	64,42	4,93
Chinolin	36,19	27,51	11,70	5,42	2,02	0,27	1,02	1,45

Tabulka 26: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Novoterra a půdy TA ČR

Analyt	TA ČR [ng/g]							
	Novo původní	Smodch	Novo po	Smodch	Půda původní	Smodch	Půda po	Smodch
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,41	0,01	0,43	0,00	0,70	0,40	0,38	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,43	0,02	0,45	0,02	0,74	0,44	0,39	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,34	0,03	0,34	0,00	0,31	0,00	0,31	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,38	0,00	0,38	0,01	0,67	0,41	0,37	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,51	0,15	0,48	0,01	0,39	0,07	0,39	0,04
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,38	0,02	0,37	0,01	0,44	0,13	0,34	0,00
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,42	0,01	0,42	0,00	0,66	0,36	0,40	0,01
3 – methylcholanthren	3,95	0,02	4,53	0,67	3,96	0,12	4,36	0,08
Acenaften	6,10	0,89	6,16	1,96	0,77	0,05	1,05	0,25
Acenaftylen	13,79	1,48	11,67	1,62	2,00	0,22	2,04	0,58
Akridin	4,76	0,21	5,15	2,62	2,90	0,04	2,79	0,01
Antracen	27,07	1,31	20,39	0,82	3,05	0,56	2,24	0,26
Benzo[a]antracen	27,03	14,61	20,12	1,60	17,89	7,28	14,15	0,38
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	9,42	0,17	8,97	0,07	8,68	0,01	8,50	0,06
Benzo[a]pyren	15,86	0,79	9,50	0,31	13,05	5,28	10,94	0,42
Benzo[b]fluoranten	81,52	12,45	25,45	2,58	32,01	11,97	22,92	2,57
Benzo[ghi]perylen	17,99	2,43	11,79	1,41	25,48	4,04	16,28	1,81
Benzo[k]fluoranten	29,19	1,77	12,87	0,37	17,94	6,34	13,46	0,04
Benzo[b]thiofen	2,60	0,21	1,51	0,62	<LOQ	0,00	0,00	0,00
Benzo[e]pyren	9,15	0,21	12,98	1,25	17,06	0,56	9,79	0,51
Benzofuran	352,53	65,69	148,29	108,37	<LOQ	0,00	0,00	0,00
Bifenyl	95,21	10,35	70,18	15,97	0,54	0,77	2,08	0,66
Karbazol	17,90	1,93	14,33	1,40	3,82	0,34	3,73	0,18
Chrysen	33,58	22,53	19,78	1,29	18,43	6,18	13,88	1,62
Dibenzo[a,h]antracen	7,74	10,95	<LOQ	0,00	8,15	2,84	<LOQ	0,00
Dibenzofuran	94,49	9,44	64,00	10,53	1,62	1,07	2,77	0,33
Dibenzothiofen	2,31	0,82	1,72	0,24	1,10	0,44	0,82	0,22
Fluoranten	50,20	9,73	57,90	5,07	40,45	9,65	24,50	4,09
Fluoren	23,39	2,84	19,71	3,17	0,86	1,21	1,74	0,34
Indan	31,00	4,48	14,38	10,15	<LOQ	0,00	1,63	2,31
Inden	6,04	0,91	3,51	2,06	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Indeno(1,2,3-cd)pyren	13,90	10,43	7,96	0,86	21,90	11,14	15,81	0,99
Indol	3,39	0,61	3,84	0,85	0,79	1,11	1,35	0,33
Isochinolin	21,74	2,55	13,84	2,73	5,30	1,06	7,09	0,98
Naftalen	368,25	53,92	251,90	34,29	1,51	0,02	5,29	2,06
1 – methylnaftalen	58,24	8,89	51,77	14,48	1,37	0,14	3,33	0,16
2,3,6 – trimethylnaftalen	4,20	0,37	3,00	0,41	0,19	0,27	0,55	0,09
2,6 – dimethylnaftalen	23,58	2,48	21,22	4,34	0,45	0,63	1,90	0,04
2 – methylnaftalen	511,30	57,43	655,82	59,96	3,07	0,69	15,57	3,04
Perylen	47,88	0,37	48,43	0,19	49,51	0,57	49,25	0,02
Fenantren	124,56	17,08	92,19	4,25	18,79	7,94	15,04	2,98
1-methylfenantren	37,45	3,40	25,46	2,71	3,34	0,15	2,91	0,23
Fenantridin	5,09	0,54	3,79	0,06	2,92	0,09	2,86	0,01
Pyren	75,67	3,45	69,76	4,29	35,25	1,66	25,04	3,85
Chinolin	32,19	4,48	13,52	3,94	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00

Tabulka 27: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Novoterra a černozemě

Analyt	Černozem [ng/g]							
	Novo původní	Smodch	Novo po	Smodch	Půda původní	Smodch	Půda po	Smodch
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,41	0,01	0,45	0,03	0,74	0,32	0,38	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,43	0,02	0,50	0,06	1,01	0,67	0,39	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,34	0,03	0,34	0,01	0,36	0,02	0,31	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,38	0,00	0,38	0,01	0,42	0,03	0,37	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,51	0,15	0,54	0,01	0,58	0,03	0,38	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,38	0,02	0,38	0,01	0,49	0,12	0,35	0,00
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,42	0,01	0,45	0,06	1,04	0,75	0,39	0,00
3 – methylcholanthren	3,95	0,02	3,92	0,02	4,40	0,24	4,58	0,21
Acenaften	6,10	0,89	7,10	3,36	1,36	0,18	0,98	0,22
Acenaftylen	13,79	1,48	26,47	14,96	2,98	0,70	1,74	0,41
Akridin	4,76	0,21	3,03	0,10	3,28	0,28	3,16	0,14
Antracen	27,07	1,31	32,47	2,55	5,20	2,20	1,66	0,08
Benzo[a]antracen	27,03	14,61	14,21	0,05	8,21	0,69	6,63	0,42
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	9,42	0,17	8,40	0,02	8,91	0,34	8,47	0,10
Benzo[a]pyren	15,86	0,79	<LOQ	0,00	7,12	0,51	<LOQ	0,00
Benzo[b]fluoranten	81,52	12,45	13,33	0,50	11,30	1,76	9,11	1,02
Benzo[ghi]perylen	17,99	2,43	<LOQ	0,00	13,13	2,13	5,10	7,21
Benzo[k]fluoranten	19,94	14,86	7,09	0,05	8,44	0,96	7,12	0,18
Benzo[b]thiofen	2,60	0,21	1,53	1,61	0,31	0,01	<LOQ	0,00
Benzo[e]pyren	9,15	0,21	6,00	0,28	5,55	0,51	5,38	0,25
Benzofuran	352,53	65,69	35,28	49,90	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Bifenyl	95,21	10,35	56,14	36,56	3,19	1,10	1,95	0,73
Karbazol	17,90	1,93	14,58	1,18	5,43	0,25	3,44	0,04
Chrysen	33,58	22,53	14,11	0,27	10,41	0,85	7,22	0,16
Dibenzo[a,h]antracen	7,74	10,95	<LOQ	0,00	10,50	3,46	3,11	4,40
Dibenzofuran	94,49	9,44	47,78	24,32	4,08	1,24	2,69	0,39
Dibenzothiofen	2,31	0,82	2,21	0,45	1,74	0,19	0,93	0,04
Fluoranten	50,20	9,73	85,32	0,95	34,64	1,83	13,38	1,59
Fluoren	23,39	2,84	25,94	10,17	3,12	1,74	1,75	0,30
Indan	31,00	4,48	5,62	7,95	3,24	1,03	1,22	1,73
Inden	6,04	0,91	2,31	3,27	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Indeno(1,2,3-cd)pyren	13,90	10,43	<LOQ	0,00	10,55	2,31	7,20	0,33
Indol	3,39	0,61	1,76	0,58	2,05	0,15	<LOQ	0,00
Isochinolin	21,74	2,55	11,30	4,71	11,94	0,44	5,46	0,28
Naftalen	368,25	53,92	281,42	17,04	7,92	1,84	2,70	3,82
1 – methylnaftalen	58,24	8,89	122,68	14,85	2,95	0,74	2,05	0,60
2,3,6 – trimethylnaftalen	4,20	0,37	1,74	0,56	0,78	0,20	0,35	0,04
2,6 – dimethylnaftalen	23,58	2,48	23,96	4,52	2,39	0,53	1,50	0,37
2 – methylnaftalen	511,30	57,43	1017,50	4,19	13,68	4,05	8,94	5,47
Perylen	47,88	0,37	47,37	0,13	48,67	0,83	47,80	0,26
Fenantren	124,56	17,08	160,38	14,38	41,51	6,05	9,45	1,53
1-methylfenantren	37,45	3,40	21,63	2,15	3,92	1,81	1,60	0,11
Fenantridin	5,09	0,54	2,14	3,02	3,51	0,24	2,97	0,16
Pyren	75,67	3,45	73,04	3,48	33,93	0,20	15,06	1,55
Chinolin	32,19	4,48	6,80	4,66	3,01	1,04	0,85	1,21

Tabulka 28: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Novoterra a kambizemě

Analyt	Kambizem [ng/g]							
	Novo původní	Smodch	Novo po	Smodch	Půda původní	Smodch	Půda po	Smodch
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,41	0,01	0,83	0,20	0,74	0,07	0,65	0,06
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,43	0,02	1,11	0,22	0,86	0,06	0,77	0,11
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,34	0,03	0,35	0,03	0,38	0,01	0,32	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,38	0,00	0,44	0,03	0,51	0,00	0,43	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,51	0,15	0,55	0,12	0,72	0,21	0,45	0,05
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,38	0,02	0,54	0,06	0,47	0,02	0,42	0,04
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,42	0,01	0,83	0,13	0,70	0,03	0,68	0,07
3 – methylcholanthren	3,95	0,02	4,10	0,16	4,58	0,01	5,83	1,02
Acenaften	6,10	0,89	7,88	0,21	2,50	1,46	6,22	4,18
Acenaftylen	13,79	1,48	13,87	0,10	5,18	1,86	5,74	0,46
Akridin	4,76	0,21	3,11	0,44	3,09	0,14	3,39	0,17
Antracen	27,07	1,31	26,07	1,76	11,80	1,67	19,67	10,98
Benzo[a]antracen	27,03	14,61	24,72	1,26	68,04	2,70	114,39	56,40
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	9,42	0,17	9,00	0,07	11,52	0,27	11,24	0,83
Benzo[a]pyren	15,86	0,79	9,51	0,09	68,98	8,02	146,87	6,64
Benzo[b]fluoranten	81,52	12,45	32,68	0,49	143,24	7,14	214,03	89,37
Benzo[ghi]perylen	17,99	2,43	13,25	0,49	275,36	72,42	324,70	71,77
Benzo[k]fluoranten	19,94	14,86	14,43	1,53	71,52	3,47	105,12	44,74
Benzo[b]thiofen	2,60	0,21	1,96	0,54	0,20	0,28	0,16	0,22
Benzo[e]pyren	9,15	0,21	16,74	0,22	95,58	12,27	76,46	3,53
Benzofuran	352,53	65,69	162,35	113,69	<LOQ	0,00	0,00	0,00
Bifenyl	95,21	10,35	93,63	4,65	5,44	5,61	7,76	0,35
Karbazol	17,90	1,93	13,07	1,31	9,49	0,75	11,67	4,70
Chrysen	33,58	22,53	25,86	2,20	78,37	9,41	103,14	35,57
Dibenzo[a,h]antracen	7,74	10,95	<LOQ	0,00	36,57	9,04	63,43	39,74
Dibenzofuran	94,49	9,44	90,68	1,77	6,17	3,50	9,48	1,30
Dibenzothiofen	2,31	0,82	4,11	0,65	5,25	0,81	6,31	1,44
Fluoranten	50,20	9,73	85,35	13,39	139,04	18,18	189,31	76,43
Fluoren	23,39	2,84	22,73	0,68	4,55	1,44	8,04	3,60
Indan	31,00	4,48	17,10	11,78	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Inden	6,04	0,91	3,91	1,98	1,64	0,06	1,55	0,03
Indeno(1,2,3-cd)pyren	13,90	10,43	7,87	0,56	107,24	20,65	169,90	101,86
Indol	3,39	0,61	2,52	0,07	2,04	0,64	1,57	0,08
Isochinolin	21,74	2,55	12,48	1,83	16,58	11,95	11,17	2,44
Naftalen	368,25	53,92	281,45	99,66	7,27	7,83	6,55	3,48
1 – methylnaftalen	58,24	8,89	86,00	10,72	4,29	4,09	6,87	1,27
2,3,6 – trimethylnaftalen	4,20	0,37	3,79	0,07	1,91	0,76	1,72	0,29
2,6 – dimethylnaftalen	23,58	2,48	33,06	0,57	4,21	4,06	6,52	0,13
2 – methylnaftalen	511,30	57,43	991,36	115,46	25,81	30,45	42,74	6,29
Perylen	47,88	0,37	48,64	0,33	59,81	1,34	72,10	14,19
Fenantren	124,56	17,08	131,73	17,06	75,74	9,54	98,05	28,53
1-methylfenantren	37,45	3,40	31,79	0,06	14,14	2,69	13,26	1,65
Fenantridin	5,09	0,54	3,60	0,14	3,41	0,03	3,44	0,44
Pyren	75,67	3,45	92,06	11,34	151,20	11,56	167,12	53,64
Chinolin	32,19	4,48	5,43	0,08	0,96	1,36	0,85	1,20

Tabulka 29: Koncentrace všech analytů v extraktech z biouhlu Novoterra a fluvizemě

Analyt	Fluvizem [ng/g]							
	Novo původní	Smodch	Novo po	Smodch	Půda původní	Smodch	Půda po	Smodch
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,41	0,01	0,69	0,24	0,46	0,01	0,43	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,43	0,02	0,91	0,43	0,48	0,01	0,46	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,34	0,03	0,35	0,01	0,32	0,02	0,33	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,38	0,00	0,43	0,02	0,39	0,00	0,39	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,51	0,15	0,66	0,01	0,44	0,08	0,67	0,06
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,38	0,02	0,45	0,08	0,36	0,01	0,36	0,01
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,42	0,01	0,69	0,32	0,47	0,00	0,43	0,00
3 – methylcholanthren	3,95	0,02	3,95	0,05	4,65	0,16	5,04	0,26
Acenaften	6,10	0,89	7,73	1,12	5,06	4,62	1,74	0,18
Acenaftylen	13,79	1,48	14,94	0,88	2,87	0,50	2,27	0,42
Akridin	4,76	0,21	3,29	0,59	3,10	0,05	2,78	0,01
Antracen	27,07	1,31	24,32	2,52	16,09	15,86	4,86	1,57
Benzo[a]antracen	27,03	14,61	14,79	2,18	81,32	71,47	32,06	17,68
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	9,42	0,17	8,94	0,01	9,45	0,29	8,55	0,10
Benzo[a]pyren	15,86	0,79	6,55	0,22	61,28	53,36	24,72	12,63
Benzo[b]fluoranten	81,52	12,45	17,23	2,45	135,68	82,93	53,56	28,72
Benzo[ghi]perylen	17,99	2,43	<LOQ	0,00	94,46	12,94	41,51	15,19
Benzo[k]fluoranten	19,94	14,86	8,68	0,66	66,81	40,22	25,05	13,62
Benzo[b]thiofen	2,60	0,21	2,52	0,48	0,32	0,01	0,15	0,21
Benzo[e]pyren	9,15	0,21	8,32	1,33	71,19	9,83	30,10	1,35
Benzofuran	352,53	65,69	242,72	82,20	<LOQ	0,00	0,90	1,28
Bifenyl	95,21	10,35	103,79	7,82	3,41	0,78	3,09	0,94
Karbazol	17,90	1,93	13,50	1,46	6,75	1,82	4,59	0,11
Chrysen	33,58	22,53	14,43	1,75	70,78	45,63	27,45	10,46
Dibenzo[a,h]antracen	7,74	10,95	<LOQ	0,00	28,92	15,24	12,03	6,51
Dibenzofuran	94,49	9,44	92,43	0,89	4,93	1,61	3,73	0,88
Dibenzothiofen	2,31	0,82	2,43	0,29	2,66	0,67	1,60	0,41
Fluoranten	50,20	9,73	52,97	4,47	169,45	140,87	76,64	15,65
Fluoren	23,39	2,84	23,51	0,06	5,80	3,53	2,97	0,13
Indan	31,00	4,48	26,98	8,80	1,44	2,04	1,47	2,08
Inden	6,04	0,91	5,46	1,60	1,29	0,28	<LOQ	0,00
Indeno(1,2,3-cd)pyren	13,90	10,43	<LOQ	0,00	86,26	47,00	32,29	15,39
Indol	3,39	0,61	2,62	0,56	1,67	0,15	1,14	0,02
Isochinolin	21,74	2,55	15,82	1,08	15,57	4,01	8,73	1,52
Naftalen	368,25	53,92	371,61	97,32	6,27	0,30	4,78	4,01
1 – methylnaftalen	58,24	8,89	110,38	19,69	2,92	0,31	2,87	0,71
2,3,6 – trimethylnaftalen	4,20	0,37	4,04	0,05	1,17	0,32	0,72	0,04
2,6 – dimethylnaftalen	23,58	2,48	35,62	1,83	2,68	0,68	2,32	0,33
2 – methylnaftalen	511,30	57,43	1130,22	191,62	12,91	1,21	14,42	7,27
Perylen	47,88	0,37	47,51	0,19	62,23	12,82	52,53	3,88
Fenantren	124,56	17,08	116,47	9,63	67,76	48,01	35,60	12,49
1-methylfenantren	37,45	3,40	30,63	1,57	8,02	5,58	3,47	0,07
Fenantridin	5,09	0,54	3,61	0,16	3,45	0,27	2,92	0,07
Pyren	75,67	3,45	73,99	6,53	143,66	114,77	64,96	18,08
Chinolin	32,19	4,48	8,20	1,41	2,02	0,27	0,97	1,38

Tabulka 30: Koncentrace všech analytů v extraktech pomocí termální desorpce

Analyt	Novoterra původní		Novoterra po		Kambizem původní		Kambizem po	
	Průměr [ng/g]	Smodch [ng/g]	Průměr [ng/g]	Smodch [ng/g]	Průměr [ng/g]	Smodch [ng/g]	Průměr [ng/g]	Smodch [ng/g]
1,1'-Bifenyl, 2,2',3,4,4',5'-hexachloro-	0,37	0,01	0,38	0,02	0,38	0,01	0,39	0,00
1,1'-Bifenyl, 2,2',4,4',5,5'-hexachloro-	0,39	0,02	0,38	0,03	0,41	0,02	0,42	0,01
1,1'-Bifenyl, 2,2',5,5'-tetrachloro-	0,31	0,01	0,31	0,01	0,30	0,01	0,34	0,04
1,1'-Bifenyl, 2,3',3,4,6'-pentachloro-	0,37	0,00	0,37	0,01	0,37	0,01	0,38	0,02
1,1'-Bifenyl, 2,4,4'-trichloro-	0,38	0,02	0,35	0,01	0,39	0,07	0,61	0,39
1,1'-Bifenyl, 2,3',4,4',5'-Pentachloro-	0,37	0,02	0,36	0,03	0,39	0,02	0,41	0,01
1,1'-Bifenyl 2,2′,3,4,4′,5,5′-heptachloro-	0,36	0,00	0,36	0,00	0,36	0,00	0,36	0,00
3 – methylcholanthren	3,74	0,00	3,74	0,00	3,74	0,00	3,75	0,01
Acenaften	1,67	0,38	7,88	1,87	4,61	1,20	4,55	1,65
Acenaftylen	9,74	2,83	38,94	12,65	5,32	1,74	6,46	2,76
Akridin	3,16	0,07	3,45	0,06	2,93	0,10	3,06	0,00
Antracen	18,40	1,55	40,06	3,39	3,74	0,58	4,61	0,56
Benzo[a]antracen	4,35	0,08	4,45	0,23	5,91	0,06	3,77	0,14
7,12 – dimethylbenzo[a]antracen	8,25	0,00	8,26	0,01	8,26	0,01	8,27	0,02
Benzo[a]pyren	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Benzo[b]fluoranten	4,06	0,26	4,04	0,15	6,47	0,30	3,95	0,21
Benzo[ghi]perylen	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Benzo[k]fluoranten	4,07	0,16	4,05	0,03	4,27	0,70	3,97	0,10
Benzo[b]thiofen	4,64	4,53	21,92	20,89	4,51	2,14	5,50	2,39
Benzo[e]pyren	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Benzofuran	151,08	23,78	721,11	102,12	59,96	29,64	98,22	19,60
Bifenyl	302,05	107,17	654,23	293,48	68,93	28,79	79,34	36,24
Karbazol	4,76	0,75	7,75	0,71	7,45	0,55	6,86	0,83
Chrysen	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	5,85	0,50	<LOQ	0,00
Dibenzo[a,h]antracen	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Dibenzofuran	188,43	32,80	254,33	12,50	11,99	2,34	11,87	3,62
Dibenzothiofen	2,64	0,44	4,49	0,09	1,60	0,66	1,43	0,15
Fluoranten	26,38	1,53	40,37	0,97	10,04	0,61	9,95	0,18
Fluoren	6,99	0,81	88,79	5,71	15,07	4,62	17,94	5,51
Indan	6,20	8,77	58,74	73,08	12,81	5,39	21,63	4,31
Inden	4,16	4,57	109,18	133,76	37,52	20,44	61,37	14,11
Indeno(1,2,3-cd)pyren	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00	<LOQ	0,00
Indol	34,41	22,64	277,54	48,31	1385,15	409,28	1324,77	374,15
Isochinolin	32,10	12,78	138,82	68,14	120,53	44,16	108,39	42,19
Naftalen	1649,67	23,67	2812,10	285,38	78,87	31,49	100,74	36,95
1 – methylnaftalen	37,56	3,84	436,26	61,62	39,15	16,92	47,26	22,71
2,3,6 – trimethylnaftalen	0,90	0,07	8,17	1,33	10,63	3,43	4,99	2,00
2,6 – dimethylnaftalen	4,86	0,59	45,74	5,30	16,57	6,26	14,58	6,40
2 – methylnaftalen	124,64	6,90	1218,41	8,47	151,55	69,74	179,53	85,31
Perylen	46,83	0,02	46,89	0,06	46,88	0,06	46,95	0,09
Fenantren	218,50	3,39	322,87	28,65	24,25	6,84	27,03	1,79
1-methylfenantren	3,58	0,19	26,41	0,84	3,76	0,37	3,73	0,02
Fenantridin	3,64	0,13	4,80	0,24	3,50	0,07	3,46	0,19
Pyren	45,16	1,93	37,14	9,10	8,56	0,89	6,23	0,47
Chinolin	47,31	23,09	124,78	70,86	56,86	21,46	57,55	24,63

Tabulka 31: Všechny stanovené analyty v optimálním extraktu z PSE optimalizace 1.část

Aminy, Amidy					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
9-Octadecenamide, (Z)-	918	1221,73	2372,9	57038	2666526
Nitrily					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzenepropanenitrile	838	518,365	1251,8	26129	1033931
Hexadecanenitrile	804	973,11	1903,7	6595,7	219537
Alkoholy, Fenoly					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Phenol, 2-methyl-	908	375,375	1066,6	19892	711475
Phenol, 3-methyl-	897	388,428	1085,1	40824	1561591
Phenol, 2-methoxy-4-propyl-	809	683,333	1465,6	15400	704472
Phenol, 2-methoxy-	906	405,145	1107,9	47019	1740967
Phenol, 4-ethyl-	871	454,562	1171,3	39531	1929191
2-Decen-1-ol	827	485,864	1211,2	1940,2	97827
Phenol, 4-ethyl-2-methoxy-	870	545,005	1285	23774	918431
2-Methoxy-4-vinylphenol	814	574,375	1322,4	11257	526869
Phenol, 2,6-dimethoxy-	884	599,484	1354,7	44379	2061850
2,4-Di-tert-butylphenol	904	716,233	1510,4	89868	3084838
1,4-benzenediol, 2,5-dimethoxy-	849	818,131	1657,6	148979	6372451
1-Hexadecanol	856	1077,47	2088,8	2698,9	121522
1-Eicosanol	896	1454,49	2913,5	6223,5	251370
á-Sitosterol	855	1713,97	3470	9231,8	779262
Thunbergol	817	1773,84	3560,9	5449,3	374320
1-Heptatriacotanol	815	1798,22	3596,3	3896,2	375751
Aldehydy, Ketony					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
1-(3H-Imidazol-4-yl)-ethanone	801	362,854	1048,9	1811,7	84627
2,5-Furandione, 3,4-dimethyl-	873	366,983	1054,8	22563	702917
Ethanone, 1-(2-pyridinyl)-	858	369,913	1058,9	7640,6	270532
Acetophenone	911	394,089	1093,1	31363	1089151
2,5-Pyrrolidinedione, 1-methyl-	913	402,414	1104,4	32015	1161704
(S)-(+)-2',3'-Dideoxyribonolactone	800	474,076	1196,3	73883	3572576
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	912	558,591	1302,1	8954,9	351534
1(3H)-Isobenzofuranone	816	610,273	1368,6	17330	786313
Ethanone, 1-(3-hydroxy-4-methoxyphenyl)-	885	706,177	1496,3	57297	2340205
Butyrovanillone	861	775,707	1594,6	53712	2367200
Ethanone, 1-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphenyl)-	918	872,211	1740,2	98375	3652302
2(3H)-Furanone, 5-dodecyldihydro-	859	1092,66	2117,1	27668	912298
á-Amyrone	827	1737,08	3507,5	2753	161427
Cholest-4-en-3-one	810	1820,66	3625	18086	1321083
2-Nonadecanone	823	1841,11	3650,7	2604,2	188781
Karboxylové kyseliny a jejich estery					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Octanoic acid	883	448,235	1163,2	44245	2012426
Benzoic acid	889	448,834	1164	28284	2027935
Nonanoic acid	827	523,826	1258,6	53169	2526323
Hydrocinnamic acid	838	581,568	1331,6	18141	1104811
Benzoic acid, 3-hydroxy-, methyl ester	832	653,097	1424,8	10957	490650
o-Cyanobenzoic acid	863	695,92	1482,5	44295	2051502
Undecanoic acid	837	748,401	1556	24849	1518832
Pentadecanoic acid	824	945,471	1857,9	13133	602850
Hexadecanoic acid, methyl ester	910	984,964	1924,3	72367	2181992
n-Hexadecanoic acid	868	1007,87	1964	227029	14495541
Oleic Acid	825	1107,84	2145,9	3615	361306
Octadecanoic acid	848	1117,23	2163,8	6957,1	338484
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	912	1230,39	2390,9	34798	1261607
Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester	800	1683,53	3419,3	4665,2	251598

Tabulka 32: Všechny stanovené analyty v optimálním extraktu z PSE optimalizace 2.část

(Cyklo-)Alkany, Alkeny					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Tridecane	848	556,46	1299,4	13892	551778
Nonadecane	891	707,975	1498,8	35062	1164003
Hexadecane	935	778,771	1599	19163	754922
Dodecane, 2,7,10-trimethyl-	814	846,037	1699,1	19038	610641
1-Iodo-2-methylundecane	886	1136,21	2199,8	11559	391240
Tetracosane	867	1186,56	2299,9	18969	664692
Nonadecane, 2-methyl-	893	1234,78	2400	12123	461747
Octacosane	822	1368,45	2700,2	32528	1037992
Heptacosane	942	1451,56	2905,9	39629	1809017
Eicosane, 2-methyl-	862	1495,52	3018,9	13184	467010
Hentriacontane	931	1659,49	3376,4	18065	1027011
2-Tridecene, (Z)-	881	627,855	1391,2	16907	664423
1-Tetradecene	854	773,909	1592,1	6734,5	215205
1,19-Eicosadiene	803	1315,1	2576,4	5761,5	243154
Nonacos-1-ene	864	1550	3150,1	25537	1345795
Benzeny					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
PAHs a jejich substituované varianty					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Naphthalene	944	490,126	1216,5	98734	3516789
Naphthalene, 1-methyl-	858	574,775	1322,9	21776	831528
1H-Indene, 1-ethylidene-	842	588,095	1340	16072	635642
Biphenyl	864	636,513	1402,4	33837	1311448
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	809	669,347	1446,7	6537,8	256853
Anthracene	912	929,42	1831,5	33671	1180829
S heteroatomem síry					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
S heteroatomem dusíku					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Indole-5-aldehyde	838	930,952	1834	9492,3	442260
9H-Carbazole-9-methanol	857	959,79	1881,6	14307	510191
S heteroatomem kyslíku					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Halogenované sloučeniny					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Furan-2-carbonyl chloride, tetrahydro-	899	462,421	1181,4	7633,9	249247
Benzoyl bromide	806	548,868	1289,9	21380	799366

Tabulka 33: Všechny stanovené analyty v optimálním extraktu z optimalizace termální desorpce 1.část

Aminy, Amidy					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
1,4-Benzenediamine, N-(1-methylethyl)-N'-phenyl-	899	1104,51	2139,6	43315	1486476
Tert-octyldiphenylamine	870	1193,76	2314,8	3108,2	98166
Nitrily					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Pentadecanenitrile	820	972,91	1903,4	11688	430511
Alkoholy, Fenoly					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Phenol, 2-methyl-	939	376,041	1067,6	1349516	47339281
Phenol, 3-methyl-	928	389,028	1085,9	1960238	92870408
Phenol, 2-methoxy-	900	405,811	1108,7	3216646	118683951
Phenol, 2,6-dimethyl-	826	419,797	1126,7	191332	6853550
Phenol, 3,5-dimethyl-	882	443,573	1157,2	382195	19816108
Phenol, 2-ethyl-	915	455,228	1172,2	1132434	48503637
Phenol, 2,3-dimethyl-	819	466,15	1186,2	146467	5184826
2-Methoxy-6-methylphenol	870	470,812	1192,2	120730	4099298
2-Methoxy-5-methylphenol	813	477,073	1200,2	10196	434572
Creosol	903	480,27	1204,2	399802	14722082
Phenol, 2-ethyl-4-methyl-	861	501,715	1231	27929	929106
Phenol, 2-ethyl-5-methyl-	834	511,039	1242,6	181382	6091534
Phenol, 4-ethyl-2-methoxy-	917	545,271	1285,4	467932	18879095
2-Methoxy-4-vinylphenol	892	574,509	1322,6	283763	11008445
Phenol, 2,6-dimethoxy-	923	599,55	1354,8	424830	16133680
3,5-Dimethoxy-4-hydroxytoluene	801	670,746	1448,6	84262	3243629
2,4-Di-tert-butylphenol	955	716,167	1510,3	752301	25426734
1-Dodecanol, 3,7,11-trimethyl-	852	864,152	1727,5	67051	2093544
1-Hexadecanol	906	1077,01	2087,9	2696,7	102029
Aldehydy, Ketony					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
3-Methylcyclopentane-1,2-dione	921	362,92	1049	964573	34375148
2-Cyclopenten-1-one, 2,3-dimethyl-	883	372,178	1062,1	460658	16661555
Acetophenone	846	394,622	1093,8	417096	17926723
2-Cyclopenten-1-one, 3-ethyl-2-hydroxy-	859	424,992	1133,4	134351	4239032
Ethanone, 1-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphenyl)-	809	871,878	1739,6	19215	800885
Karboxylové kyseliny a jejich estery					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzoic acid, methyl ester	893	412,471	1117,3	30810	979800
Hexadecanoic acid, methyl ester	919	984,898	1924,2	90342	2799926
17-Octadecynoic acid	812	1010,54	1968,6	11063	512177
Linoelaidic acid	848	1122,23	2173,2	12135	758155
Succinic acid, di(2-ethylhexyl) ester	836	1126,89	2182,1	59334	2068532
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	899	1230,05	2390,2	12915	405853
Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester	814	1293,99	2529	5807,8	183912

Tabulka 34: Všechny stanovené analyty v optimálním extraktu z optimalizace termální desorpce 2.část

(Cyklo-)Alkany, Alkeny					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Undecane	861	406,61	1109,8	299488	8268365
Dodecane	919	479,537	1203,3	246415	8543127
Undecane, 2,6-dimethyl-	844	489,127	1215,2	256702	8281716
Tridecane	923	556,527	1299,4	462139	15732318
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	842	615,201	1374,9	47502	1751768
Tetradecane	937	633,583	1398,6	467534	16143998
Cyclotridecane	807	702,58	1491,5	40764	1767067
Pentadecane	914	707,975	1498,8	164485	5846211
Hexadecane	931	778,837	1599,1	282123	9287737
Decane, 2,6,8-trimethyl-	813	810,472	1646,2	35403	1473683
Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	856	831,718	1677,8	66536	2300279
Eicosane	937	909,973	1799,4	255252	7743334
Heneicosane	923	1028,52	1999,8	145670	4944283
Heptacosane	949	1368,25	2699,7	124716	4369967
Hentriacontane	928	1495,25	3018,2	85129	3349465
1-Dodecene	915	473,543	1195,7	195265	6877474
3-Tetradecene, (Z)-	917	550,799	1292,3	93156	4135774
1-Tridecene	922	627,855	1391,2	377598	13450625
Cetene	928	773,909	1592,1	99492	3328191
3-Octadecene, (E)-	885	841,575	1692,5	19277	666696
1-Nonadecene	912	905,91	1793	26641	837878
1-Hexene, 6-phenyl-4-(1-phenylethoxy)-	814	920,429	1816,6	16221	563353
1-Docosene	870	1133,42	2194,5	10493	305934
Benzeny					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzene, 1-methoxy-3-methyl-	816	362,121	1047,9	214619	7174690
Benzene, undecyl-	802	1292,72	2526,2	6556,8	200183
Benzeneethanol, à-methyl-	826	1382,83	2735,2	5187,2	176335
PAHs a jejich substituované varianty					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
1H-Indene, 3-methyl-	816	458,292	1176,1	137770	4673108
Naphthalene, 1,2-dihydro-	885	462,554	1181,6	100205	4593548
Naphthalene	906	490,326	1216,7	433288	15712923
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	907	558,858	1302,4	116946	4553323
1H-Indene, 1-ethylidene-	801	574,975	1323,2	112353	4147556
Fluorene	848	793,556	1621	20960	895519
Anthracene	825	929,353	1831,3	30243	1104780
Anthracene, 2-methyl-	883	1001,28	1952,6	5813	197381
Fluoranthene	822	1129,55	2187,1	8143,8	307538
S heteroatomem síry					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
S heteroatomem dusíku					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2,5-Pyrrolidinedione, 1-methyl-	806	403,546	1105,8	280746	11151733
Indolizine	876	564,918	1310,2	225858	8849902
Indole, 3-methyl-	867	638,045	1404,5	151491	7197351
1H-Isoindole-1,3(2H)-dione, 2-methyl-	853	666,15	1442,4	36454	1744842
1H-Isoindole-1,3(2H)-dione, 2-(hydroxymethyl)-	881	695,787	1482,3	45619	2126898
9H-Carbazole, 9-nitroso-	836	959,523	1881,1	12184	441311
S heteroatomem kyslíku					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzofuran, 2-methyl-	849	423,393	1131,3	51065	2108594
Benzofuran, 2,3-dihydro-	806	494,389	1221,8	171253	6584183
2-n-Octylfuran	821	976,506	1909,6	26147	863480
Halogenované sloučeniny					
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Retenční index**	**Výška píku**	**Plocha píku**

Tabulka 35: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původního biouhlu Novoterra 1.část

Aminy, Amidy				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Methenamine	956	523.98 , 1.505	248254	2451997
(2-Aziridinylethyl)amine	866	827.949 , 2.772	1088,3	14680
1,4-Benzenediamine, N-(1-methylethyl)-N'-phenyl-	898	1103.92 , 1.742	11459	88905
Tert-octyldiphenylamine	814	1191.91 , 1.604	7717,5	59042
1,4-Benzenediamine, N-(1,3-dimethylbutyl)-N'-phenyl-	840	1223.91 , 1.716	1814,7	13169
Benzenamine, 4-octyl-N-(4-octylphenyl)-	873	1491.88 , 2.020	15700	141235
Benzamide	859	591.973 , 1.756	3245,3	24838
Benzenesulfonamide, N-butyl-	925	907.941 , 1.716	138749	1153986
Dodecanamide	890	1127.92 , 1.412	15763	94680
Acetamide, 2-fluoro-	818	1143.92 , 0.680	6779,1	33367
9-Octadecenamide, (Z)-	881	1219.91 , 1.492	23376	149043
Nitrily				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzonitrile	951	343.998 , 1.208	75148	793526
2-Pyridinecarbonitrile	902	391.993 , 1.445	898,66	6506,4
Benzonitrile, 3-methyl-	858	411.991 , 1.313	4344,3	41218
2-Propenenitrile, 3-phenyl-, (E)-	816	563.976 , 1.525	2935,7	20046
2-Naphthalenecarbonitrile	896	723.96 , 1.663	1747,9	11929
Alkoholy, Fenoly				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Phenol	887	331.999 , 1.181	45010	330323
2-Ethyl-1-hexanol	858	359.996 , 1.030	79301	550341
1-Propanol, 2-(2-hydroxypropoxy)-	845	367.995 , 1.175	8636,3	96853
Benzyl alcohol	890	371.995 , 1.261	37749	399826
4-Methoxycarbonyl-4-butanolide	819	383.994 , 1.584	319,2	2446,2
1-Octanol	919	387.993 , 1.082	50553	488353
p-Cresol	879	387.993 , 1.274	24944	201935
Benzenemethanol, à,à-dimethyl-	837	403.992 , 1.208	35327	455747
2,5-Pyrrolidinedione, 1-methyl-	915	403.992 , 1.538	6328,8	43962
1-Decanol, 2-ethyl-	826	435.988 , 0.983	7580,2	56339
Phenol, 3-ethyl-	853	455.986 , 1.313	16264	120168
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-	862	471.985 , 1.234	5626,1	45524
Ethanol, 2-phenoxy-	874	503.982 , 1.426	19477	126261
1-Phenoxypropan-2-ol	915	523.98 , 1.360	112389	832141
1,2,3-Propanetriol, 1-acetate	835	579.974 , 1.353	50281	417612
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-, acetate	928	599.972 , 1.274	16927	109638
Ethanol, 2-[2-(2-butoxyethoxy)ethoxy]-	836	683.964 , 1.340	13795	88847
1-Dodecanol	918	687.963 , 1.168	19044	168532
Butylated Hydroxytoluene	919	715.96 , 1.267	22370	137032
2,4-Di-tert-butylphenol	939	715.96 , 1.287	209490	1286659
Cyclododecanemethanol	808	767.955 , 1.096	3478,9	54421
Phenol, 2-(2H-benzotriazol-2-yl)-4,6-bis(1,1-dimethylpropyl)-	824	1363.9 , 1.709	1626,1	12061
Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3á)-	811	1463.89 , 1.775	795,54	5658,9
Aldehydy, Ketony				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzaldehyde	930	335.998 , 1.162	223004	2438748
Octanal	914	347.997 , 1.016	5679	35629
Benzaldehyde, 4-methyl-	906	399.992 , 1.247	28693	264846
Nonanal	932	411.991 , 1.076	21167	214624
Cinnamaldehyde, (E)-	908	423.99 , 1.214	130933	1390799
Decanal	910	487.983 , 1.142	9872,6	87911
Benzaldehyde, 2,4-dimethyl-	877	507.981 , 1.373	18427	144514
2-Decenal, (Z)-	842	531.979 , 1.188	1920,7	15722
(Z)-3-Phenylacrylaldehyde	899	547.977 , 1.485	4316,1	29203
Undecanal	958	563.976 , 1.162	3846,8	27093
Dodecanal	919	643.968 , 1.168	5315,3	36896
4-Hydroxy-3-methylbenzaldehyde	848	659.966 , 1.610	1294,3	8433,1
Tetradecanal	943	787.953 , 1.181	8649,3	67700
Cinnamaldehyde, à-pentyl-	828	819.95 , 1.386	779,76	7313
Octanal, 2-(phenylmethylene)-	864	883.944 , 1.386	7374,1	52104
3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzaldehyde	820	891.943 , 1.426	8052,9	54545
Pentadecanal-	895	1199.91 , 1.241	1466,8	13373
Octadecanal	836	1623.87 , 2.020	670,83	7452,7
2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-	944	331.999 , 1.214	41702	438617
4,4-Dimethyl-2-cyclopenten-1-one	859	347.997 , 1.148	14298	149852
p-Benzoquinone, 2-methyl-	855	359.996 , 1.241	2038,6	26450
2-Cyclopenten-1-one, 2,3-dimethyl-	826	371.995 , 1.208	15701	176021
Acetophenone	928	395.992 , 1.294	68085	817681
2-Cyclopenten-1-one, 3-ethyl-	814	399.992 , 1.307	7558,9	82722
Ethanone, 1-(3-methylphenyl)-	807	471.985 , 1.333	7891,3	72764
2-Decanone	840	475.984 , 1.142	5591,1	47209
2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-	813	475.984 , 1.254	20014	189321
2-Undecanone	862	551.977 , 1.162	8058,7	58846
Ethanone, 1-(3,4-dimethylphenyl)-	836	583.974 , 1.399	1821,3	11848
5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	842	671.965 , 1.241	18832	124995
Propiophenone, 2'-methyl-	872	699.962 , 1.716	1943,7	15893
2,6-Dimethoxybenzoquinone	868	755.956 , 1.874	4501,4	32141
Benzophenone	953	815.95 , 1.624	30688	229947
2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl-	820	935.938 , 1.168	5825,7	42182

Tabulka 36: 1. Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původního biouhlu Novoterra 2.část

Karboxylové kyseliny a jejich estery				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Octanoic acid	830	447.987 , 1.155	4923,5	32779
Nonanoic acid	857	519.98 , 1.201	15984	87339
Benzoylformic acid	830	547.977 , 1.419	65356	418450
o-Cyanobenzoic acid	943	695.962 , 1.749	7829,8	56133
Dodecanoic acid, methyl ester	833	723.96 , 1.162	7423,5	44777
Benzoic acid, 2-hydroxy-, pentyl ester	848	743.958 , 1.313	3615,6	21263
Oxalic acid, cyclobutyl dodecyl ester	827	831.949 , 1.162	1831,4	17033
Benzoic acid, 2-ethylhexyl ester	816	859.946 , 1.300	16229	118152
Benzoic acid, (4-benzoyloxy-2-chlorophenyl) ester	873	931.939 , 1.736	1425,4	10710
Benzoic acid, heptyl ester	811	971.935 , 1.327	2766,4	22403
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	812	975.934 , 1.465	1523,7	10399
Hexadecanoic acid, methyl ester	887	983.934 , 1.188	37412	253907
Hexadecanoic acid, ethyl ester	809	1023.93 , 1.181	4662,1	27742
Benzoic acid, 4-(1,1-dimethylethyl)-, ethenyl ester	897	1063.93 , 1.518	3054,3	21775
9-Octadecenoic acid (Z)-, methyl ester	870	1083.92 , 1.234	7257,5	46281
2-Propenoic acid, 3-(4-methoxyphenyl)-, 2-ethylhexyl ester	918	1119.92 , 1.492	1903,1	12641
Succinic acid, 2-ethylhexyl 2-methylbutyl ester	854	1123.92 , 1.254	7811,2	49763
Benzoic acid, pentadecyl ester	891	1195.91 , 1.373	2205	15005
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	946	1227.91 , 1.307	391897	3171397
Benzoic acid, tetradecyl ester	807	1243.91 , 1.393	1612,3	11466
1,3-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	811	1387.89 , 1.439	12278	85792
(Cyklo-)Alkany, Alkeny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl-	927	343.998 , 0.917	698526	3890348
Cyclopentane, 1,3-dimethyl-2-(1-methylethylidene)-, trans-	839	347.997 , 0.970	32367	170194
Decane, 2,6,7-trimethyl-	842	355.996 , 0.931	116893	862105
2,2,4,4-Tetramethyloctane	800	367.995 , 0.937	98716	495632
Undecane	921	407.991 , 0.964	287598	1574625
Dodecane	944	479.984 , 1.016	471769	4173889
Decane, 2,3,5,8-tetramethyl-	817	503.982 , 0.983	9122,2	65268
Hexadecane	881	515.98 , 0.977	24822	189324
Cyclopentane, butyl-	807	519.98 , 1.030	4912,2	44490
Undecane, 3,8-dimethyl-	867	539.978 , 0.983	70692	505379
Tridecane	919	555.976 , 1.036	410070	3132611
Nonadecane	879	571.975 , 0.997	125147	1193773
Undecane, 4,8-dimethyl-	827	595.972 , 1.030	41679	448919
Tridecane, 3-methyl-	889	611.971 , 1.036	95139	981180
Tetradecane	967	631.969 , 1.049	3525488	28417563
Diphenylmethane	810	671.965 , 1.465	1856,7	10768
Cyclotetradecane	850	675.964 , 1.096	13541	96102
Cyclooctane, 1,4-dimethyl-, trans-	811	679.964 , 1.049	11817	144129
Cyclopentadecane	876	771.955 , 1.082	51000	422680
Cyclohexane, octyl-	821	823.95 , 1.129	8397,4	64573
Dodecane, 2,6,11-trimethyl-	824	827.949 , 1.063	12229	145851
1,2-Diphenylcyclopropane	806	883.944 , 1.525	1516,8	11705
Norharmane, N-methyl-	888	1015.93 , 1.954	982,98	7492,8
Octadecane, 1-(ethenyloxy)-	805	1039.93 , 1.201	10218	117110
1,7-Dimethyl-4-(1-methylethyl)cyclodecane	802	1271.9 , 1.175	1728,6	17173
Heptacosane	959	1279.9 , 1.162	647548	6732795
Decane, 2,6,8-trimethyl-	809	1383.89 , 1.201	250,44	2914,1
Hentriacontane	872	1711.86 , 1.874	5562	82530
2,4,4-Trimethyl-1-hexene	847	327.999 , 0.917	169444	905080
2-Pentene, 2,4,4-trimethyl-	809	371.995 , 1.016	21704	135813
4-Dodecene	880	403.992 , 0.977	18139	118575
1-Dodecene	875	475.984 , 1.003	104896	976053
1-Tridecene	940	627.969 , 1.063	59359	375137
Cetene	899	703.962 , 1.069	40689	320299
5-Octadecene, (E)-	810	871.945 , 1.076	1525,2	16254
1-Docosene	923	1075.92 , 1.214	7085	49439
1-Nonadecene	810	1131.92 , 1.129	5650,2	70492
Squalene	943	1415.89 , 1.419	160669	1146088
Benzeny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Toluene	966	327.999 , 0.858	48840665	227718976
Benzene, propyl-	923	327.999 , 0.997	203826	1138204
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	948	331.999 , 1.003	544820	3090530
Benzene, (1-methylethyl)-	899	367.995 , 1.082	53537	333467
Benzene, 1-propynyl-	815	383.994 , 1.181	4125,2	30239
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	852	395.992 , 1.076	13536	92621
Benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-	893	431.989 , 1.115	26467	191377
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	826	455.986 , 1.162	6857,8	61374
Benzene, heptyl-	845	615.97 , 1.188	8098,2	51003
Benzene, (1-methylheptyl)-	806	695.962 , 1.208	5589,9	38550
Benzene, 1-methyl-4-(phenylmethyl)-	832	751.957 , 1.452	12655	78269
Benzene, (1-butylheptyl)-	850	803.952 , 1.181	12181	85200
Benzene, (1-propyloctyl)-	851	811.951 , 1.188	7323,4	47455
Benzene, (1-ethylnonyl)-	857	827.949 , 1.195	8122,9	56549
Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	910	831.949 , 1.439	9986	62954
Benzene, decyl-	847	835.948 , 1.214	8810,5	57205
Benzene, (1-methyldecyl)-	874	851.947 , 1.208	18084	115883
Benzene, (1-butyloctyl)-	811	867.945 , 1.188	2218,7	17971
Benzene, undecyl-	848	903.942 , 1.221	8350,7	53409
Benzene, (1-methylundecyl)-	864	919.94 , 1.208	12720	78820
Benzenesulfonanilide	864	1063.93 , 2.046	1840,4	15818

Tabulka 37: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původního biouhlu Novoterra 3.část

PAHs a jejich substituované varianty				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Indane	933	379.994 , 1.129	30280	221616
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	874	451.987 , 1.175	5282,5	52493
Naphthalene-D8	908	487.983 , 1.379	64322	604316
Naphthalene	956	491.983 , 1.386	312289	2782459
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	900	559.976 , 1.558	8537,3	57158
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,2,3,3-pentamethyl-	805	571.975 , 1.155	7990,7	75416
Naphthalene, 1-methyl-	951	575.974 , 1.399	95884	626261
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-3,3-dimethyl-	835	579.974 , 1.313	23672	181118
Biphenyl	960	635.968 , 1.452	82828	508488
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	857	647.967 , 1.399	2952,2	16636
Naphthalene, 2-ethyl-	865	647.967 , 1.412	23674	160381
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	938	671.965 , 1.432	27864	181378
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	926	687.963 , 1.465	7360,7	64041
Naphthalene, 2-methoxy-	876	691.963 , 1.531	4330,2	29720
Naphthalene, 1,2-dimethyl-	855	695.962 , 1.472	4246,3	27816
Acenaphthylene	828	695.962 , 1.584	9519,9	60728
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	841	711.961 , 1.452	12846	81578
Acenaphthene-d10	895	715.96 , 1.551	52053	325426
Naphthalene, 1-propyl-	826	719.96 , 1.399	2977	19701
Acenaphthene	824	719.96 , 1.558	3141,3	19831
2-Naphthalenecarboxaldehyde	877	735.958 , 1.650	5612,7	44878
Naphthalene, 1-methyl-7-(1-methylethyl)-	892	783.954 , 1.406	5822,5	38839
Naphthalene, 2-(1-methylethyl)-	861	791.953 , 1.492	4032,6	26157
Fluorene	898	791.953 , 1.577	12427	84087
4,4'-Dimethylbiphenyl	859	795.952 , 1.432	2031,4	14259
Anthracene, 9,10-dihydro-	888	871.945 , 1.538	5179,6	40014
2,6-Diisopropylnaphthalene	882	875.944 , 1.360	13370	89679
9H-Fluoren-9-one	943	895.942 , 1.742	11905	93748
Anthracene-D10-	919	923.94 , 1.736	46571	359567
1-Phenanthrenol	862	927.939 , 1.624	1730,2	12349
Phenanthrene	963	927.939 , 1.736	65411	523968
Anthracene	907	935.938 , 1.723	17718	149354
Naphthalene, 1-phenyl-	906	967.935 , 1.696	1124	7953,8
1,2-Acenaphthylenedione	827	979.934 , 1.987	533,38	4033,2
2-Fluorenecarboxaldehyde	895	987.933 , 1.775	1479,2	11346
Phenanthrene, 4-methyl-	862	999.932 , 1.716	11750	99855
Phenanthrene, 2-methyl-	928	1015.93 , 1.756	11557	112534
4,4'-Biphenyldicarboxaldehyde	810	1027.93 , 1.736	145,58	2183,2
4-Hydroxy-9-fluorenone	814	1027.93 , 1.914	867,75	7433,2
1H-Indene, 2-phenyl-	818	1035.93 , 1.795	195,39	1362,2
Naphthalene, 2-phenyl-	899	1039.93 , 1.729	4603,5	34621
9,10-Anthracenedione	835	1039.93 , 1.907	708,03	4672,5
Phenanthrene, 3,6-dimethyl-	856	1063.93 , 1.683	2456,7	23514
Octadecahydro-benzo[cd]pyrene	801	1067.93 , 1.399	1181,2	8710,4
Phenanthrene, 2,5-dimethyl-	867	1079.92 , 1.742	9290,4	90312
Fluoranthene	926	1095.92 , 1.881	13990	121507
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-6-undecyl-	812	1107.92 , 1.452	1831,6	11763
Benzo[b]naphtho[2,3-d]furan	906	1127.92 , 1.828	1760,7	13326
Pyrene	923	1127.92 , 1.980	13925	125279
Phenanthrene, 2,3,5-trimethyl-	812	1135.92 , 1.742	5880,5	53787
11H-Benzo[a]fluorene	922	1171.91 , 1.921	1641,8	13660
7H-Benzo[c]fluorene	854	1187.91 , 1.967	1123,4	10451
Naphthacene	812	1295.9 , 2.158	836,9	6877,2
Chrysene-D12	832	1295.9 , 2.204	6943,1	62934
Benz[a]anthracene	851	1299.9 , 2.211	1557,8	13273
11H-Benzo[b]fluorene	880	1159.92 , 1.861	768,38	6603,6
Pyrene, 1-methyl-	822	1203.91 , 2.013	1819,8	16481
Benzo[ghi]fluoranthene	877	1267.91 , 2.158	510,77	4749,9
Chrysene, 1-methyl-	858	1351.9 , 2.204	165,88	1714,3
3a,6-Methano-3aH-indene, 2,3,4,5,6,7-hexahydro-	838	387.993 , 1.063	33019	228457
1(2H)-Acenaphthylenone	842	783.954 , 1.624	1989,4	14681
3,3'-Dimethylbiphenyl	825	787.953 , 1.432	2463,7	15674
[1,1'-Biphenyl]-4-carboxaldehyde	872	839.948 , 1.577	6236,2	54689
4H-Cyclopenta[def]phenanthrene	836	1011.93 , 1.795	1215,2	14586
Cyclopenta(def)phenanthrenone	910	1083.92 , 1.954	743,74	5260,1
9-Ethyl-10-methylanthracene	827	1091.92 , 1.663	2868,4	22395

Tabulka 38: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původního biouhlu Novoterra 4.část

S heteroatomem síry				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
S heteroatomem dusíku				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2-Pyrrolidinone	946	387.993 , 1.571	5031,3	46517
3-Pyridinol	872	399.992 , 1.419	4204,6	37232
2(1H)-Pyridinone, 3-methyl-	805	415.99 , 1.379	2246,8	15675
Succinimide	914	427.989 , 1.657	2802,3	18960
Glutarimide	886	443.988 , 1.544	2404,6	24144
2-Piperidinone	894	471.985 , 1.676	1121,8	8570,5
Quinoline	903	531.979 , 1.511	11855	86978
Isoquinoline	905	547.977 , 1.551	2447,4	19875
Indole	846	563.976 , 1.630	1716,7	10557
Quinoline, 5-methyl-	832	619.97 , 1.511	11694	88208
1,2-Dimethylbenzimidazole	865	731.959 , 1.795	838,91	6034,5
Phenanthridine	912	931.939 , 1.808	1408,6	10990
Benzo[f]quinoline	812	939.938 , 1.795	360,31	3295
Anthrone	868	951.937 , 1.696	1533	11320
9H-Carbazole, 9-methyl-	811	1023.93 , 1.855	780,63	5930,5
S heteroatomem kyslíku				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2(3H)-Furanone, dihydro-5-methyl-	821	324 , 1.214	1586	19454
2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-	898	327.999 , 1.148	46869	475828
Benzofuran	926	355.996 , 1.142	221836	1685925
2-Pyrrolidinone, 1-methyl-	814	371.995 , 1.419	1252,6	11845
4-Methyl-5H-furan-2-one	848	375.994 , 1.485	818,05	5949,2
2(3H)-Furanone, 5-ethyldihydro-	817	383.994 , 1.346	2695,6	27166
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-	905	383.994 , 1.511	4736,8	35236
2,5-Furandicarboxaldehyde	809	395.992 , 1.452	2896,6	17252
2(3H)-Furanone, 5-acetyldihydro-	873	427.989 , 1.597	424,06	3359,6
1,4-Dioxane-2,5-dione, 3,6-dimethyl-	907	451.987 , 1.558	6195,7	40258
Ethyl-2-benzofuran	895	495.982 , 1.287	52515	492605
Benzofuran, 4,7-dimethyl-	878	507.981 , 1.294	33966	335671
2,3-Benzofurandione	821	587.973 , 1.630	35121	243030
1(3H)-Isobenzofuranone	938	611.971 , 1.729	18530	136824
Diphenyl ether	868	651.967 , 1.452	5416,8	31735
2H-1-Benzopyran-2-one, 3-methyl-	813	727.959 , 1.650	4185,4	30637
Dibenzofuran	922	743.958 , 1.551	56611	374407
2H-1-Benzopyran-2-one, 6-methyl-	886	771.955 , 1.690	1162,4	8167,8
5-Hydroxymethyldihydrofuran-2-one	848	831.949 , 2.204	1625,8	13274
Pyrrolo[1,2-a]pyrazine-1,4-dione, hexahydro-	888	891.943 , 2.257	1515,9	12394
Naphtho[2,1-b]furan, 1,2-dimethyl-	819	911.941 , 1.571	1667,2	15181
Naphtho[2,1-b]furan, dodecahydro-3a,6,6,9a-tetramethyl-	807	915.94 , 1.373	956,29	5778
2(3H)-Furanone, 5-dodecyldihydro-	888	1091.92 , 1.406	4915,3	33675
Halogenované sloučeniny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Methylene chloride	892	339.998 , 0.785	141538	903675
Benzyl chloride	920	363.996 , 1.162	27329	256954
Chloromethyl octanoate	846	555.976 , 1.201	2785,1	17421
Chloromethyl nonanoate	856	631.969 , 1.208	4192,8	22575
Benzoyl chloride, 4-methyl-	841	631.969 , 1.419	6368,4	38476
Ethanone, 2-chloro-1,2-diphenyl-	844	639.968 , 1.703	1263,6	8885,1
Decane, 1-chloro-	897	691.963 , 1.142	39194	210624
Chloromethyl decanoate	810	707.961 , 1.208	2224,4	11672

Tabulka 39: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu biouhlu Novoterra po kambizemi 1.část

Aminy, Amidy				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Diphenylamine	882	807.951 , 1.624	1620,4	9710,8
Benzenesulfonamide, N-butyl-	913	907.941 , 1.716	72653	572881
1,4-Benzenediamine, N-(1-methylethyl)-N'-phenyl-	848	1103.92 , 1.749	4717,3	34859
Dodecanamide	912	1127.92 , 1.412	18993	118883
Tert-octyldiphenylamine	860	1191.91 , 1.597	6581,9	47883
9-Octadecenamide, (Z)-	871	1219.91 , 1.492	48908	317833
Tetradecanamide	816	1231.91 , 1.445	10431	74212
l-Alanine ethylamide, (S)-	884	1487.88 , 2.713	3297,3	21027
Benzenamine, 4-octyl-N-(4-octylphenyl)-	846	1491.88 , 2.026	17344	156577
(2-Aziridinylethyl)amine	914	1723.86 , 2.713	7806,4	53610
Nitrily				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzonitrile	956	343.998 , 1.208	64170	645000
3-Pyridinecarbonitrile	800	391.993 , 1.439	241,05	1618,4
2-Propenenitrile, 3-phenyl-, (E)-	818	563.976 , 1.518	2022,2	12933
2-Naphthalenecarbonitrile	892	723.96 , 1.663	1401,5	9119,9
1-Naphthalenecarbonitrile	815	743.958 , 1.663	1796,7	11801
Oleanitrile	820	1075.92 , 1.307	758,19	5963,8
Alkoholy, Fenoly				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Phenol	853	331.999 , 1.175	34104	262426
2-Ethyl-1-hexanol	887	359.996 , 1.036	118614	820205
Benzyl alcohol	955	371.995 , 1.267	69955	695647
1-Octanol	904	387.993 , 1.082	72223	713077
p-Cresol	906	387.993 , 1.267	21255	173299
Benzenemethanol, à,à-dimethyl-	840	403.992 , 1.201	7582,9	89099
Ethanol, 2-phenoxy-	849	503.982 , 1.426	49049	318561
2-Undecanethiol, 2-methyl-	815	515.98 , 0.997	29732	302008
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-, acetate	872	599.972 , 1.267	7505,9	48521
1-Undecanol	920	687.963 , 1.168	23654	176765
2,4-Di-tert-butylphenol	900	715.96 , 1.280	26055	153925
1,3-Benzenediol, monobenzoate	890	931.939 , 1.729	1114,8	8415,8
1-Hexadecanol	904	959.936 , 1.195	10300	80955
1-Hexadecen-3-ol, 3,5,11,15-tetramethyl-	807	995.932 , 1.148	24761	184312
Ethanol, 2-(9-octadecenyloxy)-, (Z)-	811	1295.9 , 1.274	5214,8	38048
1-Eicosanol	874	1367.9 , 1.320	1626,2	8909,4
Octacosanol	935	1451.89 , 1.465	16447	134529
Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3á)-	826	1463.89 , 1.775	472,55	3530,4
Cholesterol	829	1583.87 , 2.468	3144,2	34389
á-Sitosterol	810	1707.86 , 3.181	7515,1	112264
Aldehydy, Ketony				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2-Heptenal, (Z)-	888	324 , 1.016	2576,3	26996
Benzaldehyde	923	335.998 , 1.155	245643	2593188
Octanal	823	347.997 , 1.023	9183	59471
Benzaldehyde, 3-methyl-	905	399.992 , 1.247	32180	369032
Nonanal	899	411.991 , 1.076	4618,7	56886
Cinnamaldehyde, (E)-	907	423.99 , 1.221	85823	901798
Decanal	914	487.983 , 1.135	7463,7	66509
(Z)-3-Phenylacrylaldehyde	800	547.977 , 1.478	3087,6	19661
Benzaldehyde, 4-propyl-	936	551.977 , 1.340	326126	2117685
Undecanal	932	563.976 , 1.162	3071,5	22188
Benzaldehyde, 4-hydroxy-	808	607.971 , 1.597	2984,3	21667
Octanal, 2-(phenylmethylene)-	818	883.944 , 1.386	6008,8	43306
3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzaldehyde	819	895.942 , 1.412	6341,3	41045
Dodecanal	877	1039.93 , 1.208	4030,1	37137
Tetradecanal	831	1095.92 , 1.221	1614,5	14098
Pentadecanal-	910	1247.91 , 1.254	5983	39253
Eicosanal-	888	1623.87 , 2.033	9708,7	101830
Hexadecanal	801	1767.86 , 2.600	1916,6	23377
2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-	926	331.999 , 1.214	18990	189804
2-Octanone	814	339.998 , 1.010	7638,5	70623
2-Cyclopenten-1-one, 3,4-dimethyl-	824	347.997 , 1.148	5552,5	57276
p-Benzoquinone, 2-methyl-	858	359.996 , 1.234	1223,4	14258
Acetophenone	934	395.992 , 1.300	70988	793921
2-Decanone	837	475.984 , 1.135	7754,4	79428
2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-	808	475.984 , 1.247	20760	205225
Ethanone, 1-(4-methylphenyl)-	839	479.984 , 1.360	16810	125378
Hydroquinone	844	531.979 , 1.577	3162,1	19360
2-Undecanone	861	551.977 , 1.162	11679	75007
5-Undecanone, 2-methyl-	808	611.971 , 1.155	2632,5	20329
4'-(2-Methylpropyl)acetophenone	947	667.965 , 1.340	23275	147386
Ethanone, 1,1'-(1,4-phenylene)bis-	895	667.965 , 1.571	36872	264396
5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	879	671.965 , 1.234	23810	156011
1-Hexanone, 1-phenyl-	834	687.963 , 1.353	4025,4	27263
2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	867	691.963 , 1.247	10733	70217
Propiophenone, 2'-methyl-	801	699.962 , 1.709	718,8	6071,5
Benzophenone	957	815.95 , 1.630	33251	239841
Methanone, (1-hydroxycyclohexyl)phenyl-	821	859.946 , 1.564	870,05	5547,3
2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl-	889	935.938 , 1.168	13844	90797

Tabulka 40: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu biouhlu Novoterra po kambizemi 2.část

Karboxylové kyseliny a jejich estery				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzeneacetic acid, à-oxo-, methyl ester	829	547.977 , 1.419	19009	121735
1,2-Benzenedicarboxylic acid	936	583.974 , 1.624	12249	75873
Benzoic acid, 2-hydroxy-, pentyl ester	832	743.958 , 1.307	2958,3	17341
Benzoic acid, 2-hydroxy-, 2-methylbutyl ester	885	771.955 , 1.320	24533	144661
Cyclopentaneacetic acid, 3-oxo-2-pentyl-, methyl ester	803	815.95 , 1.366	8491,4	54420
Benzoic acid, 2-ethylhexyl ester	823	859.946 , 1.300	12735	93711
Salicylic acid, tert.-butyl ester	804	887.943 , 1.445	1794,2	11854
Benzoic acid, tetradecyl ester	804	951.937 , 1.333	1823,1	13905
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	920	951.937 , 1.439	74426	563173
Pentadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester	888	983.934 , 1.188	26686	168543
Undecanoic acid, ethyl ester	828	1023.93 , 1.181	6531,6	39727
9-Octadecynoic acid	806	1083.92 , 1.459	1669,9	11098
9-Octadecenoic acid (Z)-, methyl ester	896	1087.92 , 1.228	6506,2	41004
Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester	824	1095.92 , 1.208	6891	43402
2-Propenoic acid, 3-(4-methoxyphenyl)-, 2-ethylhexyl ester	859	1119.92 , 1.492	1647,2	10872
Benzoic acid, tridecyl ester	839	1195.91 , 1.366	2211,1	16112
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	943	1227.91 , 1.300	314991	2406148
Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymethyl)ethyl ester	882	1287.9 , 1.472	37867	244895
Octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	873	1379.89 , 1.531	26164	179343
1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	860	1387.89 , 1.439	15716	124383
(Cyklo-)Alkany, Alkeny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Decane	889	331.999 , 0.904	73437	406907
Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl-	941	343.998 , 0.931	1931055	15605824
Nonane, 2,6-dimethyl-	876	351.997 , 0.931	11071198	85189336
Cyclooctane, 1,4-dimethyl-, trans-	872	403.992 , 0.964	73845	442676
Cyclopentane, hexyl-	838	519.98 , 1.043	7430,5	99419
Cyclooctane, 1,4-dimethyl-, cis-	808	631.969 , 1.056	37321	481542
Cyclotetradecane	812	675.964 , 1.102	17335	116162
1-Phenyl-5-methylheptane	868	691.963 , 1.201	8099,1	51303
Diphenylmethane	885	711.961 , 1.445	12705	80971
Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-	852	847.947 , 1.043	81933	604138
Cyclopropane, 1-ethyl-2-heptyl-	810	859.946 , 1.069	11255	113069
1,2-Diphenylcyclopropane	872	883.944 , 1.525	1133,1	7786,1
Cyclohexane, undecyl-	816	891.943 , 1.135	7695,8	56406
Heptacosane	949	1279.9 , 1.162	172265	1560830
Pentadecane	866	1339.9 , 1.168	33725	472951
Octadecane	878	1379.89 , 1.195	16023	206723
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl-	800	1527.88 , 1.472	4499,9	159901
Hentriacontane	953	1539.88 , 1.525	119632	1331341
Cyclodocosane, ethyl-	804	1619.87 , 1.808	4735,7	137102
Octacosane	892	1711.86 , 1.881	6028,4	68818
3-Undecene, (E)-	806	355.996 , 0.950	148110	874342
Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (S)-	896	371.995 , 1.010	27075	179939
2,4,6-Trimethyl-1-nonene	822	411.991 , 0.950	356,87	2390
1-Nonene	853	475.984 , 0.997	462035	4080522
Cetene	899	771.955 , 1.076	22541	191885
1-Nonadecene	934	1075.92 , 1.208	11347	74372
5-Tetradecene, (E)-	855	1079.92 , 1.115	3926	33627
1-Docosene	874	1183.91 , 1.228	2101,8	14341
17-Pentatriacontene	804	1563.88 , 1.630	2477,2	74973
Benzeny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Toluene	965	327.999 , 0.858	52581266	245587347
Benzene, propyl-	940	327.999 , 0.997	139639	776184
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	948	331.999 , 1.010	421103	2435838
Benzene, (1-methylethyl)-	924	367.995 , 1.082	53332	341319
Benzene, 1-ethynyl-4-methyl-	832	383.994 , 1.181	3895,2	29486
Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	841	419.99 , 1.129	2283,2	18584
Benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-	861	431.989 , 1.122	23129	174811
Benzene, 1-isocyano-2-methyl-	832	443.988 , 1.452	637,63	4502,6
Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	848	455.986 , 1.162	6789,2	69807
Benzene, hexyl-	858	535.978 , 1.175	4973,9	40578
Benzene, (1,3-dimethylbutyl)-	839	539.978 , 1.188	4388,9	40475
Benzene, 1,3-bis(1-methylethenyl)-	803	543.978 , 1.247	786,98	5530,3
Benzene, 2,4-diisocyanato-1-methyl-	810	607.971 , 1.280	571,26	3999,9
Benzene, (isothiocyanatomethyl)-	862	619.97 , 1.544	12015	71671
Benzene, 1-methyl-2-(phenylmethyl)-	858	743.958 , 1.465	8411	54242
Benzene, 1-methyl-4-(phenylmethyl)-	894	751.957 , 1.445	11936	69679
Benzene, nonyl-	825	767.955 , 1.201	12523	74208
Benzene, (1-butylheptyl)-	864	803.952 , 1.181	13519	100578
Benzene, (1-propyloctyl)-	858	811.951 , 1.181	7948,8	52177
Benzene, (1-ethylnonyl)-	823	827.949 , 1.195	8151,8	61358
Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	848	831.949 , 1.439	11122	68932
Benzene, (1-methyldecyl)-	867	851.947 , 1.208	12136	75678
Benzene, (1-pentylheptyl)-	827	867.945 , 1.188	9351,7	61843
Benzene, hexachloro-	831	871.945 , 1.492	1872,3	10945
Benzene, (1-propylnonyl)-	820	879.944 , 1.188	6584,7	54740
Benzene, 1,1'-(1,2-cyclobutanediyl)bis-, trans-	881	891.943 , 1.531	15819	107876
Benzene, undecyl-	812	903.942 , 1.214	5964,9	39191
Benzene, (1-methylundecyl)-	857	919.94 , 1.208	7227,6	43537

Tabulka 41: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu biouhlu Novoterra po kambizemi 3.část

PAHs a jejich substituované varianty				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	890	451.987 , 1.175	3434,2	33354
Naphthalene-D8	911	487.983 , 1.379	59142	522682
Naphthalene	955	491.983 , 1.386	263455	2325334
1-Naphthalenol	830	555.976 , 1.426	2402,2	19386
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	858	559.976 , 1.558	7370,9	49705
Indole	855	563.976 , 1.624	918,55	5415,1
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,2,3,3-pentamethyl-	886	571.975 , 1.214	3102,9	40545
Naphthalene, 1-methyl-	959	575.974 , 1.399	194685	1211362
Biphenyl	960	635.968 , 1.452	72978	438037
Naphthalene, 2-ethyl-	803	647.967 , 1.406	6649,3	47000
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	945	659.966 , 1.393	20335	121835
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	948	671.965 , 1.426	27865	176471
Naphthalene, 2-ethenyl-	871	679.964 , 1.459	1053	6752
Naphthalene, 2-(1-methylethyl)-	863	691.963 , 1.393	3597,3	22098
Acenaphthylene	917	695.962 , 1.577	8203,8	51488
1H-Isoindole-1,3(2H)-dione, 2-(hydroxymethyl)-	917	695.962 , 1.749	4293,5	29590
Acenaphthene-d10	899	715.96 , 1.551	53947	336335
Acenaphthene	891	719.96 , 1.558	2942,6	17375
o-Hydroxybiphenyl	816	735.958 , 1.558	597,57	3686,1
2-Naphthalenecarboxaldehyde	871	735.958 , 1.643	5666,1	45162
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	900	763.956 , 1.426	5258,1	34546
Naphthalene, 1-methyl-7-(1-methylethyl)-	878	783.954 , 1.406	3919	24419
1,1'-Biphenyl, 2,4'-dimethyl-	832	787.953 , 1.426	3569,6	22004
Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	859	791.953 , 1.492	3444,5	22828
Fluorene	885	791.953 , 1.571	11314	77189
[1,1'-Biphenyl]-4-carboxaldehyde	864	839.948 , 1.571	3684,2	31693
p-Hydroxybiphenyl	810	863.946 , 1.670	1428,4	10486
2,6-Diisopropylnaphthalene	880	875.944 , 1.360	14574	96258
9H-Fluoren-9-one	868	895.942 , 1.742	10019	75918
Anthracene-D10-	919	923.94 , 1.729	49607	366023
Phenanthrene	952	927.939 , 1.736	54580	417256
9H-Fluorene, 9-methylene-	883	935.938 , 1.716	11598	89815
Caffeine	884	951.937 , 1.934	644,72	5345,4
5H-Indeno[1,2-b]pyridine	856	959.936 , 1.881	2857,8	20555
1H-Indene, 1-(phenylmethylene)-	892	967.935 , 1.696	1241,9	8831,5
Anthrone	869	979.934 , 1.716	1051,8	8202,4
1,2-Acenaphthylenedione	834	979.934 , 1.993	237,62	1650
9-Phenanthrenol	813	987.933 , 1.775	968,02	7026
1H-Indene, 1-phenyl-	878	999.932 , 1.709	10953	83747
Phenanthrene, 4-methyl-	894	1015.93 , 1.749	9465,5	85151
4-Hydroxy-9-fluorenone	875	1027.93 , 1.907	541	4239,9
Naphthalene, 2-phenyl-	825	1039.93 , 1.723	4043,5	30173
9,10-Anthracenedione	900	1039.93 , 1.901	523,11	3739,2
Phenanthrene, 2,5-dimethyl-	870	1063.93 , 1.683	1640,1	14540
Anthracene, 9-(1-methylethyl)-	827	1091.92 , 1.670	2090	15066
Phenanthrene, 3,6-dimethyl-	800	1095.92 , 1.782	309,33	2401,4
Fluoranthene	955	1095.92 , 1.888	20171	169927
Pyrene	877	1127.92 , 1.980	19121	167077
Fluoranthene, 2-methyl-	860	1159.92 , 1.861	985,33	7963,1
11H-Benzo[b]fluorene	884	1171.91 , 1.921	2166,1	18516
Pyrene, 1-methyl-	845	1187.91 , 1.960	1385,3	13037
Pyrene, 4-methyl-	855	1203.91 , 2.006	1726,5	15081
Benzo[c]phenanthrene	816	1263.91 , 2.152	172,8	1702,5
Benzo[k]fluoranthene	847	1435.89 , 2.666	869,76	11570
1,1-Diethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	805	551.977 , 1.129	6090,9	68340
6H-Cyclobuta[jk]phenanthrene	922	1011.93 , 1.795	1131,3	13629
Cyclopenta(def)phenanthrenone	839	1083.92 , 1.954	849,75	6710,9
Retene	921	1167.92 , 1.696	18702	151032
9-Ethyl-10-methylanthracene	860	1135.92 , 1.736	4649,7	41093
Perylene	842	1471.88 , 3.135	479,1	5789

Tabulka 42: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu biouhlu Novoterra po kambizemi 4.část

S heteroatomem síry				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Ethanone, 1-(3-thienyl)-	830	411.991 , 1.386	788,88	7717,3
Benzothiazole	901	519.98 , 1.551	19177	135968
2-(Methylmercapto)benzothiazole	857	803.952 , 1.696	501,14	3537,7
S heteroatomem dusíku				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2-Pyrrolidinone	850	387.993 , 1.604	879,38	9192,1
2,5-Pyrrolidinedione, 1-methyl-	817	403.992 , 1.538	392,47	2562,9
1,3-Dimethyl-2,4,5-trioxoimidazolidine	808	491.983 , 1.637	231,09	1578,8
1H-Pyrrole, 2,5-dihydro-	829	819.95 , 1.115	12134	87863
5,10-Diethoxy-2,3,7,8-tetrahydro-1H,6H-dipyrrolo[1,2-a:1',2'-d]pyrazine	831	1007.93 , 2.132	6250,9	53278
S heteroatomem kyslíku				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-	851	327.999 , 1.155	18081	174689
Benzofuran	907	355.996 , 1.142	137581	972344
2-Acetyl-5-methylfuran	821	367.995 , 1.214	3402,8	44341
2(3H)-Furanone, 5-ethyldihydro-	830	383.994 , 1.346	4028,1	39547
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-	876	383.994 , 1.511	1644,5	12666
Oxirane, 2-methyl-2-phenyl-	823	395.992 , 1.082	6013,2	43408
Ethyl-2-benzofuran	807	491.983 , 1.300	38171	335229
Benzofuran, 4,7-dimethyl-	888	507.981 , 1.294	21077	182255
2(3H)-Furanone, 5-butyldihydro-	817	531.979 , 1.406	7848,1	51263
Benzofuran-2-carboxaldehyde	849	583.974 , 1.544	8134,5	62519
2(3H)-Furanone, dihydro-5-pentyl-	866	611.971 , 1.412	13911	92000
1(3H)-Isobenzofuranone	932	611.971 , 1.729	8124,8	58469
Diphenyl ether	900	651.967 , 1.445	8444	50441
Dibenzofuran	916	743.958 , 1.538	50258	328090
Oxirane, tetradecyl-	868	763.956 , 1.168	5101,2	52845
2(3H)-Furanone, 5-dodecyldihydro-	893	1091.92 , 1.406	6217,1	44026
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-6-undecyl-	851	1107.92 , 1.452	2101,9	13491
Benzo[b]naphtho[2,3-d]furan	877	1127.92 , 1.828	1787	13379
Halogenované sloučeniny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Methylene chloride	920	339.998 , 0.785	153534	955130
Benzyl chloride	951	363.996 , 1.162	34326	282101
Benzene, 1,3-dichloro-	852	379.994 , 1.155	10696	79288
Benzyl 2-chloroethyl sulfone	899	483.984 , 1.492	98288	591578
Nonane, 1-chloro-	893	691.963 , 1.135	15997	92808
9,12-Octadecadienoyl chloride, (Z,Z)-	842	1155.92 , 1.346	8273,4	76236
Methane, triiodo-	833	555.976 , 1.802	252,31	1785,1
Tetradecane, 1-iodo-	843	1419.89 , 1.234	16987	249094
Benzeneethanamine, 3-fluoro-á,5-dihydroxy-N-methyl-	838	1219.91 , 0.680	23248	119507

Tabulka 43: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původní kambizemě 1.část

Aminy, Amidy				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
(2-Aziridinylethyl)amine	804	795.952 , 2.759	2084,2	20349
Diphenylamine	817	807.951 , 1.624	526,28	3480,6
1,4-Benzenediamine, N-(1-methylethyl)-N'-phenyl-	854	1103.92 , 1.742	4467,5	33492
4-Pyridinamine, N-(1-naphthalenylmethylidene)-	824	1187.91 , 1.835	552,15	5662,8
N,N,O-Triacetylhydroxylamine	808	1451.89 , 1.287	441,7	3549,8
N-(2-Cyano-ethyl)-benzenesulfonamide	865	907.941 , 1.709	35729	274085
9-Octadecenamide, (Z)-	847	1115.92 , 1.465	5186,6	32488
Dodecanamide	916	1127.92 , 1.412	14627	89975
Benzenamine, 4-octyl-N-(4-octylphenyl)-	892	1491.88 , 2.026	8650,6	75448
Nitrily				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzonitrile	958	343.998 , 1.208	20715	215215
Alkoholy, Fenoly				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2-Ethyl-1-hexanol	922	359.996 , 1.023	7431,5	48296
Benzyl alcohol	940	371.995 , 1.254	32003	346784
1-Octanol	863	387.993 , 1.063	42034	354688
Benzenemethanol, à,à-dimethyl-	827	403.992 , 1.201	6897,7	71398
Ethanol, 2-phenoxy-	874	503.982 , 1.426	40916	270555
1-Undecanol	912	687.963 , 1.168	12748	85554
trans-2-Dodecen-1-ol	891	715.96 , 1.175	5204,4	41077
2,4-Di-tert-butylphenol	874	715.96 , 1.280	7359,7	43802
1-Dodecanol, 3,7,11-trimethyl-	858	875.944 , 1.175	8499,9	64553
18-Nonadecen-1-ol	802	947.937 , 1.115	21535	132138
1-Hexadecanol	899	959.936 , 1.195	7343,2	54316
Isophytol	836	995.932 , 1.148	10734	75794
1-Eicosanol	891	1183.91 , 1.228	3881,6	33268
Octacosanol	920	1367.9 , 1.320	13147	111427
Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3á)-	834	1463.89 , 1.775	676,28	5642,4
Cholest-5-en-3-ol (3á)-, carbonochloridate	810	1567.88 , 2.191	4952,8	52046
Cholesterol	827	1583.87 , 2.468	3469,1	41464
á-Sitosterol	835	1707.86 , 3.181	11348	166713
Aldehydy, Ketony				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzaldehyde	956	335.998 , 1.148	128551	1166635
Octanal	893	347.997 , 1.016	2864,7	22803
Benzaldehyde, 4-methyl-	897	399.992 , 1.241	755,74	8599,6
Nonanal	849	411.991 , 1.069	2656,4	21513
Decanal	867	487.983 , 1.129	3772	40110
Benzaldehyde, 4-methoxy-	843	535.978 , 1.492	785,12	5372,9
Benzaldehyde, 4-propyl-	904	551.977 , 1.333	23656	161351
Dodecanal	917	643.968 , 1.168	3449,9	24654
Tetradecanal	924	787.953 , 1.181	10814	65228
Pentadecanal-	837	839.948 , 1.181	5359,5	33499
9-Octadecenal	851	911.941 , 1.221	1035,7	8346,2
Hexadecanal	933	919.94 , 1.195	24796	156202
13-Octadecenal, (Z)-	814	1027.93 , 1.188	1676	11754
Docosanal	907	1427.89 , 1.393	87126	604579
Eicosanal-	899	1623.87 , 2.039	45922	476171
4,6-Heptadien-2-one, 3,6-dimethyl-3-(1-methylethyl)-, (E)-	815	339.998 , 0.944	1004884	5861193
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-	824	383.994 , 1.511	894,71	7804,4
Acetophenone	869	395.992 , 1.261	3695,4	48116
Levoglucosenone	873	423.99 , 1.505	2058,6	19914
Acetone	906	475.984 , 0.772	606,88	3190,6
2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-	816	475.984 , 0.865	1247	6084,3
2-Undecanone, 6,10-dimethyl-	826	635.968 , 1.155	8638,4	57381
4'-(2-Methylpropyl)acetophenone	895	667.965 , 1.346	16238	100912
Ethanone, 1,1'-(1,3-phenylene)bis-	891	667.965 , 1.571	1448,7	9485,8
5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-	829	671.965 , 1.234	7895,6	53635
1-(4-tert-Butylphenyl)propan-2-one	806	679.964 , 1.366	321,75	2285,8
Benzophenone	887	815.95 , 1.630	13624	94998
2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl-	880	935.938 , 1.168	36549	239295
2-Nonadecanone	814	1831.85 , 2.891	7486	109371
13-Methyltetradecanal	897	831.949 , 1.175	38097	269761

Tabulka 44: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původní kambizemě 2.část

Karboxylové kyseliny a jejich estery				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzoic acid, hydrazide	819	411.991 , 1.254	6053	72322
Nonanoic acid	805	519.98 , 1.181	9654,5	54306
1,2-Benzenedicarboxylic acid	954	583.974 , 1.624	9360	59047
Pentanoic acid, 2-methyl-, anhydride	824	739.958 , 1.703	245,11	1800,3
Benzoic acid, 2-hydroxy-, 2-methylbutyl ester	808	771.955 , 1.327	3386,7	19506
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	911	951.937 , 1.432	46691	346143
Hexadecanoic acid, methyl ester	879	983.934 , 1.188	24718	154164
Hexadecanoic acid, ethyl ester	828	1023.93 , 1.181	4341,5	25694
9-Octadecenoic acid (Z)-, methyl ester	874	1087.92 , 1.221	8874,1	63538
2-Propenoic acid, 3-(4-methoxyphenyl)-, 2-ethylhexyl ester	863	1199.91 , 1.518	940,41	6681,5
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	939	1227.91 , 1.300	215069	1530694
Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymethyl)ethyl ester	881	1287.9 , 1.465	13527	83812
Octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	870	1379.89 , 1.531	12948	86682
1,3-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	856	1387.89 , 1.439	7221,6	63421
(Cyklo-)Alkany, Alkeny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl-	888	343.998 , 0.911	18874	110554
Cyclooctane, 1,4-dimethyl-, trans-	814	747.957 , 1.049	4230,4	55843
Cyclopropane, 1-ethyl-2-heptyl-	833	875.944 , 1.063	2663,7	24462
1,2-Diphenylcyclopropane	891	883.944 , 1.531	1321,3	9809,6
Eicosane	804	971.935 , 1.076	2105	20372
Cyclopentane, 1-pentyl-2-propyl-	806	1131.92 , 1.135	4208,3	60380
1,7-Dimethyl-4-(1-methylethyl)cyclodecane	801	1455.89 , 1.360	3319	54194
Hentriacontane	956	1539.88 , 1.531	274930	2503233
Tridecane, 4-cyclohexyl-	844	1563.88 , 1.643	670,19	10724
Heptacosane	909	1571.87 , 1.577	9283,4	225945
Heptadecane, 2,6-dimethyl-	869	1607.87 , 1.690	787,34	21898
Hexadecane	821	1687.86 , 1.907	7259,5	178448
Undecane, 4,8-dimethyl-	828	1719.86 , 2.013	3092,7	80413
Undecane, 4,7-dimethyl-	803	1883.84 , 2.501	759,69	30830
1-Undecene, 7-methyl-	816	415.99 , 0.964	5620,6	50152
3-Dodecene, (Z)-	864	627.969 , 1.063	28597	219880
1-Tridecene	899	839.948 , 1.089	9853,3	74228
1-Docosene	889	903.942 , 1.096	9782,2	80657
1,3-Butadiene, 1,4-diphenyl-, (E,E)-	826	935.938 , 1.551	341,59	2998,3
3,7,11-Trimethyl-2,4-dodecadiene	833	971.935 , 1.129	39112	245233
1-Nonadecene	866	1079.92 , 1.122	827,81	7618,7
1-Tetradecene	816	1103.92 , 1.102	2319,5	47597
1-Decene	901	699.962 , 1.069	8280,7	62584
1-Decene, 8-methyl-	813	711.961 , 1.069	1707,7	19033
Cetene	912	771.955 , 1.082	25621	164385
Squalene	944	1415.89 , 1.412	90030	735509
Nonacos-1-ene	808	1767.86 , 2.310	2584,1	61425
Benzeny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Toluene	964	327.999 , 0.858	47838912	226052133
Benzene, propyl-	825	327.999 , 1.010	905,34	6104,5
Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	886	331.999 , 1.010	18164	100543
à-Methylstyrene	831	343.998 , 1.049	2611,9	15364
Mesitylene	920	351.997 , 1.036	27373	160581
1,3,8-p-Menthatriene	831	367.995 , 1.036	16473	100451
Benzene, 1-propynyl-	834	383.994 , 1.181	1839,6	14670
Benzenemethanethiol	891	411.991 , 1.267	15359	179271
Benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-	881	431.989 , 1.122	11828	83841
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylethyl)-	805	443.988 , 1.109	4716,5	33195
Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	867	455.986 , 1.162	3896,4	31399
Benzene, 1-(1,1-dimethylethyl)-3,5-dimethyl-	811	463.986 , 1.089	4760,6	31263
Benzene, 1,2,4-trimethyl-5-(1-methylethyl)-	890	523.98 , 1.142	50301	504807
Benzene, pentamethyl-	915	555.976 , 1.247	28599	331921
Benzene, 1,2-diethyl-3,4-dimethyl-	877	599.972 , 1.261	70471	585104
Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-5-(1-methylethyl)-	890	647.967 , 1.261	12385	93760
Benzene, hexamethyl-	941	687.963 , 1.327	49371	309633
4-t-Butyl-o-xylene	876	491.983 , 1.122	49884	379184
Diphenylmethane	910	711.961 , 1.445	3717,4	23020
Benzene, nonyl-	809	767.955 , 1.201	7471,6	43277
Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	897	831.949 , 1.439	6855,2	41664
Benzene, (1-methylundecyl)-	803	919.94 , 1.208	3018,6	22557
Benzene, (1-methyldecyl)-	834	979.934 , 1.221	7481,5	53370

Tabulka 45: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu původní kambizemě 3.část

PAHs a jejich substituované varianty				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
1H-Indene, 3-methyl-	816	459.986 , 1.228	505,43	5454,9
Naphthalene-D8	859	487.983 , 1.366	21904	239285
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	828	559.976 , 1.558	218,12	1502,8
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,2,3,3-pentamethyl-	853	571.975 , 1.155	9399,5	82589
Naphthalene, 2-methyl-	891	575.974 , 1.393	5872,6	41633
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,1,6-trimethyl-	887	583.974 , 1.228	18389	206559
Biphenyl	921	635.968 , 1.452	9833,7	59150
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	842	647.967 , 1.399	975,74	5976,6
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	887	671.965 , 1.426	6335,8	39602
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	843	695.962 , 1.472	827,01	5589,3
Acenaphthene-d10	903	715.96 , 1.551	43991	270279
Acenaphthene	848	719.96 , 1.558	968,85	5789,5
1,1,4,5,6-Pentamethyl-2,3-dihydro-1H-indene	851	735.958 , 1.353	7776,8	60244
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	864	743.958 , 1.419	2530,8	19017
Naphthalene, 2,3,6-trimethyl-	891	775.954 , 1.445	3341,7	22166
2,6-Diisopropylnaphthalene	814	843.948 , 1.366	2788	17008
9H-Fluoren-9-one	928	895.942 , 1.742	2833,4	18591
Anthracene-D10-	917	923.94 , 1.723	50665	376465
Phenanthrene	928	927.939 , 1.729	23035	170792
9H-Fluorene, 9-methylene-	908	935.938 , 1.716	4986	36852
Anthrone	882	951.937 , 1.696	371,66	2444,1
5H-Indeno[1,2-b]pyridine	887	959.936 , 1.881	1528,8	10663
1H-Indene, 1-(phenylmethylene)-	895	967.935 , 1.696	453,21	3071,5
Naphthalene, 1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	848	979.934 , 1.538	1271,9	8996,4
1H-Indene, 2-phenyl-	890	999.932 , 1.709	7632,6	60538
4H-Cyclopenta[def]phenanthrene	897	1011.93 , 1.795	1323,2	12061
Anthracene, 2-methyl-	866	1015.93 , 1.742	4950,7	41280
Naphthalene, 2-phenyl-	895	1039.93 , 1.723	2104,5	15445
9,10-Anthracenedione	888	1039.93 , 1.907	520,27	4012,5
Phenanthrene, 4,5-dimethyl-	875	1059.93 , 1.696	1901,2	16864
Phenanthrene, 3,6-dimethyl-	887	1079.92 , 1.736	2767,3	25503
Fluoranthene	952	1095.92 , 1.881	28974	239758
Anthracene, 9-propyl-	813	1111.92 , 1.696	681,05	5713,2
Benzo[b]naphtho[2,3-d]furan	907	1127.92 , 1.835	2383,9	18120
Pyrene	928	1127.92 , 1.980	36508	316434
Retene	900	1167.92 , 1.703	1967,4	15743
11H-Benzo[b]fluorene	912	1171.91 , 1.927	3047,5	26266
Pyrene, 1-methyl-	926	1187.91 , 1.960	6888,6	61989
Pyrene, 1,3-dimethyl-	849	1247.91 , 1.947	1381,8	13395
11H-Benzo[a]fluoren-11-one	870	1247.91 , 2.099	1198,9	10448
Cyclopenta(cd)pyrene, 3,4-dihydro-	813	1263.91 , 2.152	421,03	3688,1
Benzo[ghi]fluoranthene	899	1267.91 , 2.158	1826,9	16485
Triphenylene	932	1295.9 , 2.158	4474,5	46325
Chrysene-D12	856	1295.9 , 2.204	11714	110594
Naphtho[2,1,8,7-klmn]xanthene	819	1327.9 , 2.244	797,3	7543,5
Chrysene, 1-methyl-	863	1351.9 , 2.198	2614,9	31540
9H-Cyclopenta[a]pyrene	840	1367.9 , 2.356	308,94	3088,9
2,2'-Binaphthalene	845	1379.89 , 2.290	404,37	3395,6
Benzo[k]fluoranthene	936	1435.89 , 2.666	4571,8	69762
Perylene	851	1447.89 , 2.825	556,41	6251
S heteroatomem síry				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Hexathiane	897	755.956 , 1.987	2557,7	19326
Dibenzothiophene, 4-methyl-	887	971.935 , 1.703	1226,6	8258,9
Benzo[b]naphtho[1,2-d]thiophene	865	1259.91 , 2.125	1362,8	11283
S heteroatomem dusíku				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
5H-1-Pyrindine	862	567.975 , 1.610	558,47	3409,9
Benzo(b)carbazole	859	1331.9 , 2.508	173,83	1537,1
S heteroatomem kyslíku				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Carane, 4,5-epoxy-, trans	807	403.992 , 0.997	15890	113007
1,4-Dioxane-2,5-dione, 3,6-dimethyl-, (3S-cis)-	886	455.986 , 1.538	14930	99106
2(3H)-Furanone, 5-butyldihydro-	848	531.979 , 1.406	2535,2	16398
2(3H)-Furanone, dihydro-5-pentyl-	820	611.971 , 1.412	5256,9	35150
1(3H)-Isobenzofuranone	878	611.971 , 1.729	908,32	6130,8
Benzofuran	867	679.964 , 1.604	150,88	866,41
2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-	873	751.957 , 1.558	1281,9	9554,9
Octane, 1,1'-oxybis-	851	819.95 , 1.109	1098,3	7149,3
2(3H)-Furanone, 5-dodecyldihydro-	813	1091.92 , 1.406	3089,1	19954
Oxirane, tetradecyl-	824	1447.89 , 1.399	1948,3	46202
Halogenované sloučeniny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzyl chloride	914	363.996 , 1.162	5933,1	51277
1-Iodo-2-methylundecane	878	1723.86 , 2.059	6827,7	195922

Tabulka 46: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu kambizemě po biouhlu Novoterra 1.část

Aminy, Amidy				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Diphenylamine	866	807.951 , 1.624	386,24	2392,6
N-Methoxy-N-methylbenzamide	847	607.971 , 1.340	3365,1	22640
(2-Aziridinylethyl)amine	883	903.942 , 2.746	979,49	9992
Benzenesulfonamide, N-butyl-	875	907.941 , 1.709	26897	206376
Dodecanamide	901	1127.92 , 1.412	17028	106806
9-Octadecenamide, (Z)-	881	1219.91 , 1.492	93832	627819
Nitrily				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzonitrile	919	343.998 , 1.208	17541	180847
Alkoholy, Fenoly				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2-Ethyl-1-hexanol	924	359.996 , 1.023	8200,5	52340
Benzyl alcohol	954	371.995 , 1.247	19871	211293
1-Octanol	872	387.993 , 1.063	47434	402982
Ethanol, 2-phenoxy-	882	503.982 , 1.419	21755	140259
1-Dodecanol, 3,7,11-trimethyl-	802	535.978 , 0.990	87798	652247
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-, acetate	854	599.972 , 1.261	2473,6	14688
2-Methyl-1-undecanol	833	731.959 , 1.162	610,85	5095,4
Behenic alcohol	815	839.948 , 1.175	5833,8	40759
1-Pentanol, 2-ethyl-4-methyl-	811	847.947 , 1.056	2978,5	22517
n-Tridecan-1-ol	846	871.945 , 1.175	7904,7	53729
1-Hexadecanol	826	919.94 , 1.109	3487,4	24570
3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol	897	947.937 , 1.122	31452	246001
1-Octanol, 3,7-dimethyl-	816	995.932 , 1.082	827,15	7216,9
1-Eicosanol	904	1183.91 , 1.234	3743	30627
Octacosanol	946	1451.89 , 1.478	179293	2451199
Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3á)-	816	1463.89 , 1.775	523,7	4546,4
Cholest-5-en-3-ol (3á)-, carbonochloridate	805	1523.88 , 2.006	2951,5	39651
Stigmasterol	801	1663.87 , 2.930	7318,2	109972
p-Cresol	822	387.993 , 1.261	4913,1	47916
Benzenemethanol, à,à-dimethyl-	801	403.992 , 1.195	7257,5	83838
2,4-Di-tert-butylphenol	878	715.96 , 1.280	8138,7	46932
Aldehydy, Ketony				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzaldehyde	965	335.998 , 1.148	137444	1256992
Octanal	884	347.997 , 1.023	2717,3	20765
Benzaldehyde, 4-methyl-	842	399.992 , 1.241	691,7	7634,6
Nonanal	852	411.991 , 1.069	7663,7	62503
Decanal	905	487.983 , 1.129	2961,9	31018
Benzaldehyde, 2,4-dimethyl-	898	507.981 , 1.360	2617,7	21309
Benzaldehyde, 4-methoxy-	852	535.978 , 1.492	815,12	5230,2
(Z)-3-Phenylacrylaldehyde	807	551.977 , 1.472	150,47	1080,3
Undecanal	930	563.976 , 1.155	2384,7	17649
Dodecanal	905	643.968 , 1.168	2935,5	19508
Tetradecanal	882	763.956 , 1.168	14947	131798
13-Methyltetradecanal	924	831.949 , 1.175	37641	288583
Pentadecanal-	925	855.946 , 1.188	12065	83061
Octanal, 2-(phenylmethylene)-	862	883.944 , 1.386	4323,9	29460
3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzaldehyde	847	891.943 , 1.419	4443,7	28643
Hexadecanal	833	983.934 , 1.195	4822,5	36122
cis-9-Hexadecenal	844	1031.93 , 1.234	1063,6	11393
Eicosanal-	900	1623.87 , 2.039	60204	630314
Acetophenone	905	395.992 , 1.274	3752,4	43859
Dihydro-3-methylene-5-methyl-2-furanone	831	395.992 , 1.465	301,3	2660,8
Acetone	884	475.984 , 0.772	2476,3	11218
2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-	826	475.984 , 1.247	26378	368153
Ethanone, 1-(4-methylphenyl)-	807	483.984 , 1.340	732,73	6006,7
2-Dodecanone	823	627.969 , 1.168	4639,2	30339
4'-(2-Methylpropyl)acetophenone	950	667.965 , 1.340	20705	126526
Ethanone, 1,1'-(1,3-phenylene)bis-	898	667.965 , 1.571	18376	127211
5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	802	671.965 , 1.234	9387	65473
Benzophenone	866	815.95 , 1.624	18601	128470
2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl-	883	935.938 , 1.168	15552	103009
2-Nonadecanone	852	1831.85 , 2.891	8838,2	136685
Karboxylové kyseliny a jejich estery				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzoic acid, methyl ester	806	411.991 , 1.247	4569,4	51587
1,2-Benzenedicarboxylic acid	937	583.974 , 1.624	8269,1	51473
Benzoic acid, 2-hydroxy-, 2-methylbutyl ester	829	771.955 , 1.320	3834,7	22316
Oxalic acid, allyl dodecyl ester	812	931.939 , 1.089	135,41	1603,3
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	906	951.937 , 1.432	37797	278342
4-Butylbenzoic acid, 3-chlorophenyl ester	808	975.934 , 1.366	488,52	2907,5
Hexadecanoic acid, methyl ester	873	983.934 , 1.188	21726	133214
Hexadecanoic acid, ethyl ester	822	1023.93 , 1.181	6135,8	37988
9-Octadecenoic acid (Z)-, methyl ester	860	1083.92 , 1.234	5954,9	35862
Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester	859	1095.92 , 1.201	5395,9	32190
2-Propenoic acid, 3-(4-methoxyphenyl)-, 2-ethylhexyl ester	817	1199.91 , 1.518	790,76	5128,7
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	944	1227.91 , 1.300	238046	1698020
Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymethyl)ethyl ester	876	1287.9 , 1.472	19063	121567
Octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	877	1379.89 , 1.531	14727	96415
Oxalic acid, allyl octadecyl ester	817	1691.86 , 2.033	5523,7	189111

Tabulka 47: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu kambizemě po biouhlu Novoterra 2.část

(Cyklo-)Alkany, Alkeny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl-	917	343.998 , 0.911	26529	147116
Undecane	901	379.994 , 0.937	83743	491163
Undecane, 3-methyl-	847	459.986 , 0.970	10544	75251
Dodecane, 4,6-dimethyl-	895	511.981 , 0.977	36924	261960
Tridecane	887	519.98 , 0.990	25207	189239
Cyclododecane	917	687.963 , 1.175	18202	115415
Cyclooctane, methyl-	800	703.962 , 1.069	13513	93100
Cyclooctane, 1,4-dimethyl-, trans-	824	739.958 , 1.056	2728	37212
Octane, 1,1'-oxybis-	904	819.95 , 1.109	1876,9	13756
Cyclohexane, 2-propenyl-	828	823.95 , 1.122	2062,9	16202
Cyclopentane, 1-pentyl-2-propyl-	800	1275.9 , 1.181	6793,9	118769
Heptacosane	952	1279.9 , 1.162	1046074	8028840
Decane, 3,7-dimethyl-	851	1307.9 , 1.162	20565	256396
Nonadecane	872	1463.89 , 1.333	303,08	3308,7
Octadecane	900	1491.88 , 1.406	151436	2557531
Hentriacontane	962	1539.88 , 1.531	496893	6557284
Tridecane, 6-cyclohexyl-	832	1563.88 , 1.630	6234,4	129183
Hexadecane	834	1723.86 , 2.046	31329	858150
Undecane, 3,5-dimethyl-	807	1867.85 , 2.462	7235,8	214104
Octane, 2,4,6-trimethyl-	822	1887.84 , 2.548	3562	93971
Spiro[2,4]hepta-4,6-diene	877	320 , 2.053	572,07	11069
o-Cymene	877	367.995 , 1.036	12719	76583
1-Undecene, 8-methyl-	802	395.992 , 0.957	46896	297258
Cycloprop[a]indene, 1,1a,6,6a-tetrahydro-	854	459.986 , 1.234	479,16	5229,7
1-Dodecene	900	475.984 , 0.997	22385	210380
3-Tetradecene, (E)-	865	627.969 , 1.063	42063	452058
Cyclodecene, (Z)-	810	695.962 , 1.089	3626,2	25125
1,13-Tetradecadiene	828	831.949 , 1.102	1071,9	5794,6
3-Tetradecene, (Z)-	855	867.945 , 1.063	4467,7	48384
Cetene	897	903.942 , 1.096	7287,5	60331
1-Docosene	924	1075.92 , 1.214	9761,3	70497
1-Nonadecene	871	1131.92 , 1.135	1836,8	25680
Squalene	921	1415.89 , 1.419	109073	874304
Nonacos-1-ene	800	1459.89 , 1.366	1901,8	30990
1,19-Eicosadiene	821	1699.86 , 2.449	2911,9	46659
17-Pentatriacontene	813	1827.85 , 2.864	959,92	20678
Benzeny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzene, (1-methylethyl)-	890	331.999 , 1.010	16150	87020
Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	908	351.997 , 1.036	20688	120494
Benzene, 1-ethynyl-4-methyl-	920	387.993 , 1.175	2014	15461
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	926	431.989 , 1.115	5908,4	42455
Benzene, 1,2,4-trimethyl-5-(1-methylethyl)-	847	535.978 , 1.168	6133,9	65028
Benzene, pentamethyl-	899	555.976 , 1.234	12680	146047
Benzene, hexamethyl-	929	687.963 , 1.327	39800	244699
Benzene, 1-methyl-4-(phenylmethyl)-	825	743.958 , 1.465	5819,7	36535
Benzene, nonyl-	819	767.955 , 1.201	6937,2	39129
Benzene, (1-methylnonyl)-	813	783.954 , 1.201	2551,8	22799
Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	888	831.949 , 1.439	7288,4	44122
Stilbene	920	871.945 , 1.531	2994,6	21294
Benzene, 1,1'-(1,2-cyclobutanediyl)bis-, cis-	895	891.943 , 1.531	6045,9	39901
Benzene, (1-methylundecyl)-	831	919.94 , 1.208	4659	32155
Toluene	825	1155.92 , 0.713	591,06	3154

Tabulka 48: Všechny stanovené analyty v PSE extraktu kambizemě po biouhlu Novoterra 3.část

PAHs a jejich substituované varianty				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Naphthalene-D8	853	487.983 , 1.366	11456	121741
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	822	559.976 , 1.558	230,01	1450,6
1,1-Diethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	818	551.977 , 1.122	7267,7	55161
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,2,3,3-pentamethyl-	832	571.975 , 1.155	7676,8	62654
Naphthalene, 1-methyl-	903	575.974 , 1.393	8051,4	56775
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,1,6-trimethyl-	862	583.974 , 1.208	6968,5	77728
Naphthalene, 2-methyl-	821	587.973 , 1.432	4364,7	32849
Biphenyl	941	635.968 , 1.445	10716	64181
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	877	659.966 , 1.393	4183,3	26776
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,6,8-trimethyl-	819	667.965 , 1.294	5025,1	39696
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	939	671.965 , 1.426	8100,3	50251
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	927	687.963 , 1.465	3794,2	30826
Naphthalene, 2-methoxy-	808	691.963 , 1.525	713,72	4300,4
Acenaphthylene	924	695.962 , 1.577	3985	24246
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	896	711.961 , 1.445	4591	27869
Acenaphthene-d10	893	715.96 , 1.551	35634	218519
Acenaphthene	888	719.96 , 1.558	1320,4	7369,6
Naphthalene, 2-(1-methylethyl)-	862	743.958 , 1.412	4033,6	31729
1,1'-biphenyl, 2,6-dimethyl-	847	787.953 , 1.426	1146,3	7177,5
Naphthalene, 1,4,5-trimethyl-	906	791.953 , 1.485	2467,1	14738
Fluorene	829	791.953 , 1.571	2595	16541
4,4'-Dimethylbiphenyl	809	795.952 , 1.432	743,48	4212,1
2,6-Diisopropylnaphthalene	833	843.948 , 1.366	2519,8	17504
1,4,5,8-Tetramethylnaphthalene	875	855.946 , 1.465	3499,5	24941
2,2'-Dimethylbiphenyl	836	891.943 , 1.564	174,2	1345,5
9H-Fluoren-9-one	938	895.942 , 1.742	3589	25228
Anthracene-D10-	921	923.94 , 1.729	50960	371094
Phenanthrene	953	927.939 , 1.729	40051	296932
Anthrone	897	951.937 , 1.696	477,15	3464,1
1H-Indene, 1-(phenylmethylene)-	938	967.935 , 1.703	817,48	5232,6
Phenanthrene, 4-methyl-	884	999.932 , 1.703	8635,5	67643
Phenanthrene, 9-methyl-	844	1011.93 , 1.749	5624,6	46241
4H-Cyclopenta[def]phenanthrene	932	1011.93 , 1.795	1786,2	15744
Naphthalene, 2-phenyl-	922	1039.93 , 1.729	2900,5	21155
9,10-Anthracenedione	912	1039.93 , 1.901	737,89	5372,9
Phenanthrene, 2,3-dimethyl-	899	1075.92 , 1.716	6239,4	56373
Cyclopenta(def)phenanthrenone	893	1083.92 , 1.954	1409,7	10531
Phenanthrene, 2,5-dimethyl-	827	1095.92 , 1.775	254,48	1660,5
Fluoranthene	950	1095.92 , 1.881	42452	352372
Pyrene	927	1127.92 , 1.980	39206	335575
Phenanthrene, 2,3,5-trimethyl-	810	1135.92 , 1.716	1352,3	12489
11H-Benzo[b]fluorene	915	1159.92 , 1.861	1705,2	13629
Retene	879	1167.92 , 1.696	1355,3	10960
7H-Benzanthrene	818	1183.91 , 1.927	717,96	8458,9
Pyrene, 1-methyl-	910	1187.91 , 1.967	2332,8	20155
Pyrene, 1,3-dimethyl-	804	1247.91 , 1.960	855,64	9385,9
11H-Benzo[a]fluoren-11-one	887	1247.91 , 2.099	1384,5	11682
Benzo[b]naphtho[2,1-d]thiophene	836	1259.91 , 2.125	1733,1	13938
7H-Benz[de]anthracen-7-one	804	1259.91 , 2.158	236,48	1920,4
Benzo[ghi]fluoranthene	891	1267.91 , 2.158	3113,8	29349
Chrysene-D12	850	1295.9 , 2.204	14684	132855
Triphenylene	907	1299.9 , 2.211	9618,2	93967
Cyclopenta(cd)pyrene, 3,4-dihydro-	827	1311.9 , 2.244	698,57	6033
Naphtho[2,1,8,7-klmn]xanthene	809	1327.9 , 2.244	767,02	7446
Benz[a]anthracene, 7-methyl-	873	1351.9 , 2.191	1804,2	20852
9H-Cyclopenta[a]pyrene	827	1367.9 , 2.363	805,43	9190,6
2,2'-Binaphthalene	853	1379.89 , 2.297	269,77	2462,1
Benzo[b]fluoranthene	859	1435.89 , 2.666	6355,1	100153
Perylene	924	1471.88 , 3.135	3025,7	40396
S heteroatomem síry				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
1,2-Benzisothiazole	889	519.98 , 1.544	2987,1	20840
4-Methylnaphtho[1,2-b]thiophene	866	971.935 , 1.703	1803,6	12095
Phenaleno[1,9-bc]thiophene	855	1115.92 , 1.993	877,21	6899,6
S heteroatomem dusíku				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
9H-Carbazole, 9-nitroso-	880	959.936 , 1.881	2112,8	14968
S heteroatomem kyslíku				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
2(3H)-Furanone, 5-ethyldihydro-	820	383.994 , 1.340	564,21	6210,1
1,4-Dioxane-2,5-dione, 3,6-dimethyl-, (3S-cis)-	950	455.986 , 1.538	15471	100707
2(3H)-Furanone, dihydro-5-propyl-	822	531.979 , 1.412	2639,8	17335
2(3H)-Furanone, dihydro-5-pentyl-	810	611.971 , 1.406	5039,4	32440
1(3H)-Isobenzofuranone	858	611.971 , 1.723	897,22	6174,2
Ethanone, 1-(2,3-dihydro-1H-inden-5-yl)-	806	615.97 , 1.406	4754,9	29178
Diphenyl ether	857	651.967 , 1.445	1357,6	8278,4
2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-	836	751.957 , 1.564	1030,2	7092,4
Oxirane, tetradecyl-	925	899.942 , 1.181	6646,6	47210
2(3H)-Furanone, 5-dodecyldihydro-	832	1091.92 , 1.406	3253,5	21638
Benzo[b]naphtho[2,3-d]furan	910	1127.92 , 1.835	3520	25617
Halogenované sloučeniny				
Název	**Similarita**	**Ret. Čas**	**Výška píku**	**Plocha píku**
Benzyl chloride	923	363.996 , 1.162	8786,4	74102