

Česká zemědělská univerzita v Praze

Fakulta agrobiologie, potravinových a přírodních zdrojů

Katedra chemie



**Fakulta agrobiologie,
potravinových a přírodních zdrojů**

**Stanovení vybraných prvků v kávě metodou
instrumentální fotonové aktivační analýzy**

Diplomová práce

Bc. Zuzana Melicharová

Kvalita potravin a zpracování zemědělských produktů

RNDr. Ivana Krausová, Ph.D.

© 2021 ČZU v Praze

Čestné prohlášení

Prohlašuji, že svou diplomovou práci "Stanovení vybraných prvků v kávě metodou instrumentální fotonové aktivační analýzy" jsem vypracovala samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce. Jako autorka uvedené diplomové práce dále prohlašuji, že jsem v souvislosti s jejím vytvořením neporušila autorská práva třetích osob.

V Praze dne 26. 4. 2021

Poděkování

Ráda bych touto cestou poděkovala své vedoucí RNDr. Ivaně Krausové, Ph.D. za odborné vedení, cenné rady, trpělivost a vstřícnost při zpracování této diplomové práce. Děkuji odbornému konzultantovi Ing. Janu Táborskému, Ph.D. za rady v průběhu celého studia. Dále děkuji Ústavu jaderné fyziky AV ČR, v.v.i. za poskytnuté zázemí v laboratořích v Řeži a v mikrotronové laboratoři v Karlíně. Děkuji i všem tamějším pracovníkům za vstřícné jednání a cenné rady, které byly obohacující pro tuto práci. Dále děkuji pražárně LONGBERRY s.r.o., která své vzorky kávy darovala pro výzkum. Také děkuji své rodině a přátelům za podporu v průběhu celého studia.

Stanovení vybraných prvků v kávě metodou instrumentální fotonové aktivační analýzy

Souhrn

Káva je nápojem konzumovaným po celém světě s dlouholetou tradicí. Z důvodu časté konzumace kávy je důležité znát její vliv na zdraví organismu. Káva obsahuje přes tisíce různorodých chemických sloučenin a mezi nejznámější z nich patří kofein a chlorogenová kyselina. Tyto dvě sloučeniny již byly zkoumány v mnohých studiích, ve kterých byly prokázány jejich pozitivní účinky na lidský organismus. Káva dále obsahuje až 5 % minerálních látek v sušině, které se do ní dostávají prostřednictvím kávovníku v průběhu růstu z okolního prostředí. Obsah minerálních látek je dále ovlivněn způsobem zpracování kávových zrn. Obsah prvků v šálku kávy závisí i na samotné přípravě nápoje.

Z důvodu časté konzumace kávy a obsahu minerálních látek v ní vyvstaly hypotézy, zda jsou obsažené prvky nutričně významné, či zda jsou rizikové a snižují tak přínos kávy ve stravě člověka. Pro analýzu bylo vybráno 37 vzorků kávy odrůdy arabica (*Coffea arabica*). Vybrané vzorky káv byly analyzovány pomocí instrumentální fotonové aktivační analýzy (*Instrumental Photon Activation Analysis – IPAA*), což je nedestruktivní radioanalytická metoda. Experiment byl proveden v laboratořích Ústavu jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., aktivace vzorků byla provedena na mikrotronu MT-25. Cílem této práce bylo stanovit vybrané prvky v mleté kávě, které jsou pro člověka nutričně významné, nebo jsou rizikové, toxické.

Mezi stanovenými prvky nebyl žádný, který by byl pro organismus člověka rizikový. Rizikové prvky byly pod mezí detekce metody IPAA a nebylo tak možné jejich přítomnost s jistotou potvrdit. Mezi osmi stanovenými prvky byly nutričně významné prvky, které jsou biogenními prvky (draslík, hořčík, vápník, mangan, železo a chlor), prvky zkoumanými pro svůj pozitivní vliv na organismus (rubidium) a prvky v organismu téměř netečnými (titan).

Klíčová slova: káva, prvky, IPAA, mikrotron

Determination of selected elements in coffee by photon activation analysis

Summary

Coffee is a beverage consumed all around the world with a long tradition. It is important to know the effect on the health due to the frequent consumption of it. Coffee contains over a thousand different chemical compounds. The most known are caffeine and chlorogenic acid. These two compounds have already been studied in many studies which have shown their positive effects on the human body. Coffee also contains up to 5% of minerals in the dry matter which enter through the coffee tree plant during growth from the environment. The content of mineral substances is also influenced by the method of grain processing. The content of the elements in a cup of coffee depends on the preparation of the drink itself.

Due to the frequent consumption of coffee and the content of mineral substances it is hypothesized whether contained elements are nutritionally important or are risky and thus they reduce the benefits of coffee in the human diet. 37 samples of coffee arabica were selected for the analysis. These selected coffee samples were analyzed using Instrumental Photon Activation Analysis (IPAA), a non-destructive radioanalytical method. The experiment was performed in the laboratories of Nuclear Physics Institute of the Czech Academy of Sciences, p.r.i., the activation of the samples was performed on the MT-25 microtron. The aim of the work was to determine selected elements in ground coffee which are nutritionally important for humans or are risky, toxic.

There was no element that would be risky for the human organism. The risk elements were below the detection limit of the IPAA method and it was not possible to certainly confirm their presence with certainty. Among the eight identified elements were nutritionally important elements which are biogenic elements (potassium, magnesium, calcium, manganese, iron and chlorine), elements examined for their positive effect on the organism (rubidium) and elements almost inert in the organism (titanium).

Keywords: coffee, elements, IPAA, microtron

Obsah

1 Úvod	7
2 Vědecká hypotéza a cíle práce	8
3 Literární rešerše.....	9
3.1 Káva.....	9
3.1.1 Kávovník.....	9
3.1.2 Technologie zpracování plodů.....	10
3.1.3 Světoví producenti a exportéři.....	12
3.1.4 Pití kávy a jeho vliv na zdraví	13
3.1.5 Chemické složení kávového zrna	14
3.2 Minerální látky.....	14
3.2.1 Doporučené denní dávky	17
3.2.2 Minerální látky v kávě	18
3.2.3 Charakteristický obsah prvků dle země původu	19
3.2.4 Metody stanovení prvků v kávě.....	23
3.3 Fotonová aktivační analýza.....	23
3.3.1 Instrumentální fotonová aktivační analýza.....	24
3.3.1.1 Absolutní metoda výpočtu.....	25
3.3.1.2 Výpočet čisté naměřené plochy fotopíku	25
3.3.1.3 Relativní metoda výpočtu.....	26
3.3.1.4 Nejistota měření	27
3.3.1.5 Výhody a nevýhody IPAA	27
3.3.2 Mikrotron MT-25.....	28
4 Metodika	31
4.1 Vzorky káv.....	31
4.1.1 Příprava vzorků k analýze	32
4.1.2 Aktivace vzorků káv	33
4.1.3 Detekce záření gama.....	33
5 Výsledky.....	35
6 Diskuze	46
7 Závěr	52
8 Literatura.....	53
9 Seznam tabulek, obrázků a grafů.....	66
10 Seznam použitých zkratk a symbolů	68

1 Úvod

Zájem o zdravý životní styl je stále na vzestupu. Lidé se zajímají o kvalitu potravin i nápojů, a proto je důležité sledovat jejich složení. Jedním z často konzumovaných nápojů po celém světě je káva. Káva obsahuje látky příznivé pro zdraví (Galeone et al. 2010), ale může obsahovat i látky rizikové, které jsou pro zdraví nepříznivé (Cornelis & El-Sohemy 2007). Mezi ně patří například těžké kovy, které se do rostlin a poté do potravního řetězce dostávají prostřednictvím půdy, ve které rostliny vyrůstají (Esechie 1992). Prvkové složení půdy se liší více či méně meziregionálně a v každé zemi (Gagnon et al. 2020). Na základě těchto prvkových odlišností je možné stanovit původ plodiny (Habte et al. 2016). Další rizikové prvky, které může káva obsahovat, pocházejí například z použitých hnojiv a postřiků nebo mohou do kávy přecházet během zpracování (Dos Santos et al. 2010). Jako vhodná metoda pro stanovení prvků v kávě byla zvolena instrumentální fotonová aktivační analýza, což je radioanalytická metoda. Je nedestruktivní a citlivá, a proto je vhodná pro stanovení nízkých koncentrací prvků až v řádech ppm (Řanda et al. 1981).

2 Vědecká hypotéza a cíle práce

Pití kávy patří v soudobé společnosti k běžným zvykům. Káva se tak stává významnou pochutinou, která může mít pro člověka pozitivní i negativní vliv. Prvky přítomné v mleté zrnkové kávě jsou závislé nejen na složení zrna, které určuje její původ, ale i na jejím zpracování.

Vědecká hypotéza

- Káva obsahuje ve stravě člověka nutričně významné prvky.
- Káva obsahuje rizikové prvky, které snižují její přínos pro stravu člověka.

Cíle práce

Cílem diplomové práce bylo stanovit vybrané prvky v mleté kávě, které jsou pro člověka nutričně významné, nebo jsou rizikové/toxické, metodou instrumentální fotonové aktivační analýzy (IPAA). Pro splnění tohoto cíle diplomové práce bylo třeba provést následující kroky:

- Literární rešerše na téma káva, minerální látky v kávě, stanovení pomocí instrumentální fotonové aktivační analýzy.
- Příprava vzorků kávy k analýze.
- Provedení IPAA.
- Vyhodnocení zjištěných dat.

3 Literární rešerše

3.1 Káva

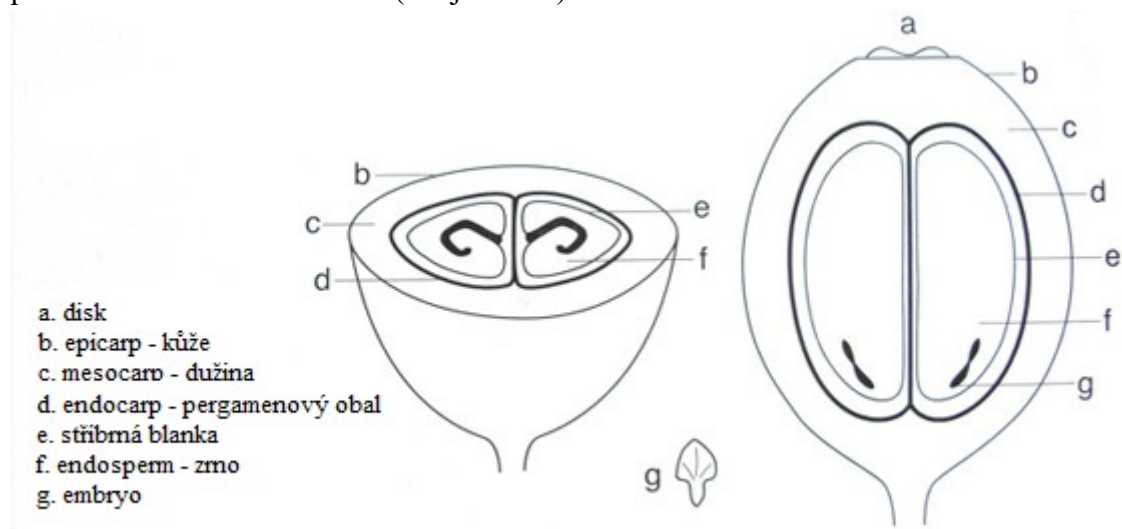
Káva společně s čajem patří mezi nejstarší nápoje a díky této tradici má mnoho konzumentů po celém světě. Každý rok se vypije přes 500 miliard šálek kávy. Káva je světový obchodní artikl a po surové ropě je nejvyhledávanější komoditou na světě (Goldschein 2011).

V prvním pololetí roku 2020 byla káva v České republice na 8. místě v žebříčku nejvíce dovážených agrárních artiklů a bylo za ní zaplaceno 2,7 miliard korun českých. Za rok 2019 byla káva v tomto žebříčku taktéž na 8. místě s celkovou hodnotou 6 miliard korun českých (ČSÚ 2020).

3.1.1 Kávovník

Kávovník je dřevina plodící plody zvané káva. Je to rostlina pěstovaná v hornatých krajinách v Jižní a Střední Americe, Asii, Indonésii, Africe a na Arabském poloostrově. Ideálními podmínkami pro růst je teplé a vlhké podnebí se stálými teplotami v rozmezí 18 až 22 °C. Kávovník řadíme do čeledi *Rubiaceae* a rodu *Coffea* společně s asi dalšími sto druhy. Nejrozšířenějšími z nich a nejvíce využívanými jsou kávovník arabský, kávovník robusta a kávovník liberijský (Kadlec 1936; Thorn 2001).

Stále zelené keře kávovníku nabývají různých výšek, známe nízké keře a keře dosahující výšky až 18 metrů. Keře kávovníku plodí po 3 až 4 letech, po dobu až 40 let a kvetou bílými květy. Nezralé zelené plody postupně mění svoji barvu ze žluté, přes červenou až do fialova a podobají se třešním. Plody (viz obrázek 1) mají na povrchu kožovitou slupku, pod ní je šťavnatá dužina a uprostřed dvě zelená kávová zrna obalená stříbrnou blankou a pergamenovým obalem (Augustín 2016). Výtěžnost jednoho keře je dva až tři kilogramy plodů, ze kterých se získá až sedm set padesát gramů zrn kávy. Během pražení zrna ztrácí přibližně 20 % své hmotnosti (Krejčí 2000).



Obrázek 1 Průřez plodem kávovníku (upraveno dle Wintgens 2004)

Kávovník arabský (*Coffea arabica*)

Kávovník arabský je stálezelený keř a je nejdůležitějším botanickým druhem, který zaujímá 70% podíl v celkové produkci kávy. Keře se pěstují především v nadmořských výškách 1000–1800 metrů, nejrozšířenější je ve Střední Americe, Kolumbii a Brazílii. Rostlina plodí v závislosti na okolních podmínkách, jako jsou vlhkost a teplo. Z důvodu různých pěstebních podmínek se od sebe odrůdy kávovníku arabského odlišují, a to vzrůstem keře, tvarem listů a květů, velikostí a barvou plodů (Augustín 2000). Káva z plodů kávovníku arabského je aromatická, jemná a obsah kofeinu v plodech je 0,9–1,6 % (Ky et al. 2001).

Kávovník robusta (*Coffea canephora*)

Kávovník robusta je druhým nejvýznamnějším druhem kávovníku a jeho světová produkce má podíl 30 %. Rostlina je robustní (odtud název), větve s listy tvoří charakteristický profil připomínající deštník. Pěstování tohoto keře je jednodušší než pěstování kávovníku arabského, je adaptabilní k místním podmínkám, méně náročný na typ půdy a odolný vůči chorobám. Plantáže s těmito keřy mají i vyšší výnos (Ukers 1922). Semena plodů jsou menší v porovnání se semeny z kávovníku arabského, mají nižší jakost a vyšší obsah kofeinu v rozmezí 1,5–3,3 % (Ky et al. 2001). Chuť kávy připravené z těchto semen je intenzivně hořká a obsahuje větší množství kofeinu (Ukers 1922).

Kávovník liberijský (*Coffea liberica*)

Keře kávovníku liberijského jsou nejvyšším druhem ze tří uvedených, tělo keře je mohutné s tlustými listy a kulovité plody jsou tmavě červené. Dužina plodů je silná a tuhá a špatně se odděluje od semen. Plody tohoto keře nejsou příliš kvalitní, chuť kávy je nahořklá a z toho důvodu je poptávka po těchto zrnech minimální. Na světové produkci se podílí pouze z 1 % a je použita do kávových směsí. Plody kávy z kávovníku liberijského mají nejnižší obsah kofeinu 1,3 % (Antol 2002).

3.1.2 Technologie zpracování plodů

Zpracování plodů kávovníku má mnoho kroků a způsobů, které velmi výrazně ovlivňují výslednou kvalitu kávy a její chuť.

Sklizeň kávovníkových bobulí

Keře kávovníku začínají plodit třetím rokem po výsadbě, sklizeň probíhá pátým rokem a plná sklizeň je dosažena až po deseti letech. Keř plodí při ideálních podmínkách až šedesát let (Augustín 2000).

Bobule z keře *Coffea arabica* dozrávají po šesti až osmi měsících, plody keře *Coffea canephora* dozrávají až po jedenácti měsících. Plody dozrávají během celého roku, ale obvykle probíhá pouze jedna hlavní sklizeň, případně jedna mezisklizeň (Žáček 1981).

Sklizeň se provádí dvěma způsoby, ručně či pásovým sběrem. Ruční tedy selektivní sběr je ekonomicky i časově náročnější. Plody dozrávají postupně a tím tento způsob sběru zvyšuje kvalitu výsledného produktu, je minimalizovaná přítomnost nedozrálých plodů, spadáných listů a úlomků větví keře ve sklizni. Pásový sběr pomocí mechanických česacích strojů je časově efektivnější a využíváný především na velkých plantážích. Stroje projíždějí mezi kávovníky

a třesou keři tak, aby zralé plody napadaly do sběracího trychtýře. Nevýhodou je nutná probírka sklizně pro odstranění úlomků keřů a listů (Thorn 2001).

Zpracování plodů kávovníku

Bezprostředně po sklizni plodů, a to maximálně do osm hodin následuje zpracování, kterým se z celých plodů získávají zelená zrna. V případě pozdějšího zpracování plody ztrácí na kvalitě a začíná proces fermentace. Mezi dvě nejběžnější metody patří zpracování suchou či mokrou cestou, jež zásadně ovlivňují kvalitu a cenu výsledného produktu (Augustín 2016).

Jednodušší a levnější variantou je suchý způsob zpracování, který se používá pro méně kvalitní zrna a na farmách s nedostatkem vodních zdrojů. Celé plody se slupkou a dužinou se ruční probírkou zbaví nečistot a následně se suší na kamenných, cihlových či betonových podlahách. Během sušení, které trvá okolo čtyř týdnů, se plody pravidelně prohrabávají kvůli rovnoměrnému rozložení. Při dosažení 12% vlhkosti je sušení ukončeno a z plodů je následně odstraněn dužnatý obal. Při tomto druhu zpracování káva dosahuje ovocné, medové, oříškové a čokoládové chutě (Wintgens 2004).

Druhým způsobem zpracování je mokrá cesta, která je finančně nákladná z důvodu potřebného velkého množství vody. Do nádrží s vodou se ponoří plody kávovníku a samy se dle kvality plody vytřídí – nedozrálé plody plavou na hladině a zralé plody se noří ke dnu. Po vytřídění je plod zbaven slupky a části dužiny, část dužiny na zrně zůstává. K oddělení této dužiny dochází během fermentace, na kterou je použita bakterie *Lactobacillus acidophilus*. Bakterie vytváří kyselinu mléčnou, která způsobuje kyselé prostředí. Fermentační proces trvá 12–72 hodin, záleží na okolní teplotě, množství dužiny a pergamenu na kterém zrna leží. Poté následuje sušení zrn trvajících asi patnáct dní, kdy klesá vlhkost kávy z 50 % vlhkosti na 12 %. Káva zpracovaná tímto způsobem má díky fermentaci kyselejší chuť s ovocným a květinovým nádechem (Wellman 1961).

Třídění, skladování, export

Když jsou zrna ideálně vysušená tak jsou tříděna dle velikosti a následně dle hustoty. Velikost je odborníky hodnocena na stupnici 10 až 20 a je preferována větší velikost, ze které je lahodnější káva.

Vytříděné zelené zrno je třeba skladovat při ideální vlhkosti, aby zrna nevysychala, ani neabsorbovala vodu a následně neplesnivěla. Zrna jsou uskladňována až dva roky v jutových pytlích, které kávu chrání před napadením hmyzem, ptáky či hlodavci (Wintgens 2004).

V celosvětovém měřítku se průměrně ročně vyprodukuje pět až šest milionů tun zelených kávových zrn a vývoz každým rokem narůstá. Export kávy do celého světa je nejčastěji prováděn lodní dopravou, dále nákladními auty či letecky (Brzoňová 2012).

Pražení kávy

Pro získání charakteristických organoleptických vlastností kávy je třeba zelená zrna zpracovat pražením. V průběhu pražení zrno ztrácí hmotnost, a to především úbytkem vody a organické hmoty. Úbytek je závislý na druhu kávy, stáří zrna, obsahu vody a sacharidů, ale i na způsobu a stupni pražení. Objem zrna se naopak zvětší až o 40 % (Augustín 2003). V Evropě se nejčastěji používají pražírny s rotujícím bubnem, ale například v Jižní Americe

se používají horkovzdušná pražicí zařízení. Výhodou pražírny s rotujícím bubnem je rotace, díky níž se všechna kávová zrna praží rovnoměrně. Tato zařízení jsou plně automatizovaná, ale i přes to je lidský faktor důležitý. Každé zelené kávovníkové zrno potřebuje jinou pražicí teplotu a jiný čas pražení, a proto je nezbytné před hlavním pražením upražit malé množství zrna pro zjištění optimálních podmínek. Při dosažení žádaného barevného odstínu a kvality zrn je třeba upražená zrna vypustit z pražicího bubnu a zprudka zchladit v chladícím tanku či na chladicí síti. Pražicí proces je definitivně ukončen proudem chladného vzduchu a pohyby chladících sít. Rychlé zchlazení je důležité pro zachování sensorických vlastností zrn. Vůně upražených zrn se ustálí tři až pět dní po pražení (Krejčí 2000).

3.1.3 Světoví producenti a exportéři

Celosvětová produkce kávy je soustředěna do rovníkové oblasti a do produkce je zapojeno přes 60 států světa. Meziročně dochází k nárůstu vyprodukovaných kávovníkových zrn společně sestále rostoucí poptávkou.

V tabulce 1 je shrnuta roční produkce kávy v tisících v šedesátikilových jutových pytlích v průběhu čtyř let od roku 2015 do roku 2018. Třemi největšími producenty kávy jsou Brazílie, Vietnam a Indonésie. Jižní Amerika s produkcí 82 379 tisíc šedesátikilových pytlů za rok 2018 se pyšní nejvyšší produkcí ze subkontinentů pěstující kávu, a to především díky produkci Brazílie, Kolumbie a Peru. V Asii a Oceánii zaujímá Vietnam, Indie a Indonésie 95 % veškeré produkce. Vietnam samotný pokrývá asi 60 %. V Africe je největším vývozcem Etiopie, která za rok 2018 vyprodukovala přes 7 500 000 šedesátikilových pytlů s kávovými zrny (ICO 2020).

Tabulka 1 Roční produkce kávy v letech 2015 až 2018 dle zemí, uvedeno v tisících 60kg pytlích (zpracováno dle ICO 10. 6. 2020)

Rok	2015	2016	2017	2018
Celkem	157 160	160 690	166 466	173 092
Afrika celkem	15 567	16 516	17 299	18 928
Etiopie	6 515	7 143	7 347	7 541
Guinea	286	270	229	248
Keňa	799	793	790	930
Pobřeží Slonoviny	1 289	817	1 474	2 450
Uganda	3 650	4 962	4 597	4 704
Ostatní	3 028	2 531	2 862	3 055
Asie a Oceánie celkem	51 837	47 930	52 203	50 053
Indie	5 830	6 161	5 813	6 002
Indonésie	12 324	11 369	10 544	10 013
Papua-Nová Guinea	827	1 062	783	886
Vietnam	31 090	27 819	33 432	31 683
Ostatní	1 766	1 519	1 631	1 469
Amerika celkem	89 757	96 243	96 965	104 128
Brazílie	53 850	55 776	55 838	63 098
Guatemala	3 410	3 684	3 734	4 007
Honduras	5 786	7 457	7 560	7 328

Kolumbie	14 009	14 634	13 824	13 858
Kuba	100	105	114	116
Mexiko	2 772	3 635	4 485	4 351
Panama	127	120	105	130
Peru	3 533	4 237	4 275	4 173
Ostatní	6 170	6 595	7 030	7 067

3.1.4 Pití kávy a jeho vliv na zdraví

Mnoho let byla káva podezřívána pouze z negativních dopadů na lidské zdraví, nyní z mnoha vědeckých prací vyplývá, že má mnoho blahodárných účinků. Bylo dokázáno, že pití kávy snižuje riziko srdečních chorob, rakoviny, mrtvice, diabetes mellitus a mnoha neurodegenerativních onemocnění (Hemmerle et al. 1997; Iwai et al. 2002; Chu et al. 2009; Bakuradze et al. 2011; Cao et al. 2011). Příkladem je kohortová studie provedená Iwai et al. (2002), do které bylo zapojeno celkem 2855 mužů a žen ve věku 40–79 let, prokázala souvislost mezi pitím kávy a vyšším věkem úmrtí a také snížení výskytu mnohých onemocnění. Za těmito účinky stojí především chlorogenová kyselina, kofein, antioxidanty, minerální látky, ale i další z více jak 1000 sloučenin, jež káva obsahuje (Clifford 1999).

Chlorogenová kyselina a další polyfenoly pomáhají intracelulární signalizaci buněk, čímž zabraňují potenciálním fyziologickým poruchám vedoucím ke vzniku různých onemocnění. Polyfenoly mají přímý účinek na tlumení zánětlivé aktivity v celém organismu při konzumaci alespoň čtyř šálků kávy denně (Chu et al. 2009). Chlorogenová kyselina působí především na buňky s vysokým obsahem tuku, které najdeme v mozku či v játrech, a ovlivňuje i obezitu. Protektivní vliv chlorogenové kyseliny na DNA snižuje riziko vzniku několika druhů rakovin (Bakuradze et al. 2011). Například metaanalýza 24 provedených studií ukázala příznivý účinek spotřeby kávy na riziko kolorektálního karcinomu (Galeone et al. 2010). Hemmerle et al. (1997) prokázali, že pravidelná konzumace kávy dokáže snížit riziko vzniku diabetes mellitus 2. typu o 67 %. Chlorogenová kyselina blokuje aktivitu enzymu glukóza-6-fosfatáza, který reguluje hladinu glukózy v krvi. Sloučeniny kávy způsobují zvýšení produkce detoxikačních enzymů, které chrání DNA před reaktivní formou kyslíku, tedy brání nukleové buňky před oxidačním poškozením (Butt & Sultan 2011). Dalším benefitem při konzumaci alespoň tří šálků kávy denně je nárůst počtu a zvýšení metabolické aktivity prospěšné gastrointestinální populace bakterií *Bifidobacterium* spp. Tyto bakterie posilují imunitu, zvyšují absorpci minerálních látek a snižují krevní tlak (Jaquet et al. 2009). Kofein pomáhá udržet integritu hematoencefalické bariéry a brání její specifické dysfunkci, která je spojená s Parkinsonovou a Alzheimerovou chorobou, snižuje transport krevních patogenů, odumřelých buněk, léků a dalších látek do mozku, kde mohou nepříznivě ovlivnit funkci přenosu nervového vzruchu (Cao et al. 2011). Korelace mezi dlouhodobým pitím kávy a zvýšením krevního tlaku či kardiovaskulárního onemocnění nebyla prokázána. Po konzumaci kávy ke krátkodobému zvýšení krevního tlaku dochází, ale maximálně po 180 minutách účinek mizí (Mesas et al. 2011). Studie Andersen et al. (2006) studující ženy v postmenopauzálním věku 55–69 let ukázala, že riziko úmrtí na kardiovaskulární onemocnění bylo u žen konzumujících 1–3 šálky kávy denně o 24 % nižší než u ostatních.

Nepříznivé účinky má pití kávy a přítomný kofein na těhotné ženy, konkrétně na plod. Konzumace kávy v těhotenství je spojena s nízkou porodní hmotností dítěte, předčasným porodem až potratem během prvního trimestru (Chen et al. 2014). Randomizovaná studie provedená Cornelis & El-Sohemy (2007) prokázala, že diterpen přítomný v nefiltrované kávě zvyšuje cholesterol, což může přispět ke vzniku srdečních chorob. Ovšem při konzumaci 2–4 šálků filtrované kávy studie uvádí ochranný účinek, což naznačuje přítomnost jiných prospěšných látek, jimiž jsou například minerální látky.

3.1.5 Chemické složení kávového zrna

Zastoupení jednotlivých chemických složek v kávovém zrně se liší dle druhu kávovníku, pěstebních podmínek a metody zpracování. Průměrné zastoupení těchto látek v zelených zrnech kávovníku v hmotnostních procentech je následující:

- Sacharidy 40–55 % – převládají nerozpustné sacharidy, př. celulóza, polymery manózy a galaktózy, v menší míře zastoupené i rozpustné sacharidy, př. glukóza, arabinóza, galaktóza a sacharóza.
- Kyseliny a fenoly 8–14 % – chlorgenové kyseliny jsou se 7 % nejzastoupenější ze skupiny kyselin, dále netěkavé kyseliny, mezi které patří kávová a chinová kyselina, v malém množství jsou zastoupeny i těkavé kyseliny, př. octová, propionová či máselná kyselina.
- Lipidové sloučeniny 8–18 % – zde je největší rozdíl v hmotnostních procentech mezi rostlinami *Coffea arabica* (15–18 %) a *Coffea canephora* (8–12 %), většinu těchto látek zastupují oleje, převážně estery kyseliny palmitové a olejové, a pouze v malém množství vosky.
- Dusíkaté sloučeniny 11–15 % – většinové zastoupení zde tvoří bílkoviny, malé množství volných aminokyselin a kofein, který je zastoupen v *Coffea arabica* zhruba 1 % a v *Coffea canephora* 1–4 %.
- Minerální látky 3–5 % – nejzastoupenějším prvkem je draslík.
- Voda 10–15 % (Augustín 2016).

3.2 Minerální látky

Chemické složení potravin je možné sledovat jako látkové složení či jako elementární složení. Elementárním složením se rozumí sledování obsahu jednotlivých prvků. Voda a organické sloučeniny tvoří převážnou část hmoty. Hlavními konstitučními prvky organických látek jsou organogenní (biogenní) prvky, jsou jimi uhlík, kyslík, vodík, fosfor, dusík a síra. Další chemické prvky obsažené v potravinách označujeme jako minerální látky (Velíšek & Hajšlová 2009).

Minerální látky jsou definovány jako prvky, které zůstávají ve vzorku potravin po úplné oxidaci (dokonalé spálení) organického podílu na oxid uhličitý a vodu. U většiny potravin tvoří minerální podíl 0,5 až 3 % hmotnosti. V tělesné hmotnosti člověka tvoří 4–5 % hmotnosti,

což je u dospělého člověka o hmotnosti 70 kg asi 3,5 kg. Zastoupení minerálních látek v těle dospělého člověka je uvedeno v tabulce 2. Z celkového množství minerálních látek je 83 % uloženo v kostech (Hopfenzitz 1999). Minerální látky jsou anorganického původu a je třeba je přijímat potravou, jelikož si je organismus neumí syntetizovat (Mandžuková 2005). V potravě mají minerální látky funkci jako anorganické substráty, účastní se výstavby tkání (vápník, fosfor, síra) a nebo působí jako anorganické biokatalyzátory (Pánek et al. 2002).

Minerální látky lze klasifikovat do skupin dle různých kritérií, např. dle biologického a nutričního významu, původu, účinků na zdraví či dle jejich množství v potravinách, a to následovně:

Majoritní minerální prvky - makroprvky

Vyskytují se v potravinách ve větším množství, obvykle v setinách až jednotkách procent, v jednotkách mg.kg^{-1} v tisících až desetitisících, a řadíme mezi ně sodík, draslík, hořčík, vápník, chlor, fosfor a síru a tvoří asi 80 % veškerých anorganických látek v organismu.

Minoritní minerální prvky - mikroprvky

Jsou v potravinách obsaženy v menších množstvích představujících desítky až stovky mg.kg^{-1} a tvoří přechod mezi majoritními a stopovými prvky, řadíme mezi ně železo a zinek.

Stopové prvky

Vyskytují se v potravinách ve velmi nízkých koncentracích, obvykle desítky a méně mg.kg^{-1} , mezi potravinářsky důležité stopové prvky patří hliník, arsen, bor, kadmium, kobalt, chrom, měď, fluor, rtuť, jód, mangan, molybden, nikl, olovo, rubidium, selen a cín (Pánek et al. 2002; Velíšek & Hajšlová 2009).

Rozdělení minerálních látek v potravinách na majoritní, minoritní a stopové zhruba odpovídá i zastoupení těchto látek v lidském organismu (viz tabulka 2). V potravinách se mohou objevovat i těžké kovy, které nejsou pro zdraví organismu příznivé.

Tabulka 2 Obsah minerálních látek v těle dospělého člověka o hmotnosti 70 kg (Velíšek & Hajšlová 2009)

Prvek	Množství	Jednotka	Prvek	Množství	Jednotka
Ca	1000 – 1500	g	Si	1,4	g
Mg	25 – 40	g	Cu	100 – 180	mg
K	140 – 180	g	Mn	10 – 20	mg
Na	70 – 100	g	Mo	5 – 10	mg
P	420 – 840	g	Co	1,0 – 1,5	mg
S	cca 140	g	Ni	10	mg
Cl	70 – 110	g	Cr	5	mg
Fe	3 – 5	g	V	1 – 20	mg
Zn	1,4 – 3,0	g	I	10 – 30	mg
F	0,8 – 2,5	g	Se	10 – 20	mg

Těžké kovy

Důležité je sledovat těžké kovy, jejichž nadměrná koncentrace může způsobovat toxicitu. Mezi těžké kovy patří například olovo, rtuť, kadmium, chrom, měď, zinek, mangan, nikl, selen, arsen, stříbro. Přestože některé těžké kovy patří mezi stopové prvky nezbytné pro správný chod organismu mají při vyšších koncentracích toxické účinky prostřednictvím metabolické interference a mutagenese, například selen či měď. Americká agentura EPA (Environmental Protection Agency) ve spolupráci s vládní agenturou ATSDR (Agency for Toxic Substances and Disease Registry) sestavily seznam nejvíce toxických prvků. V tabulce 3 jsou zpracovány maximální denní dávky příjmu 18 vybraných prvků, ze které je patrné, že kadmium, olovo, arsen a rtuť jsou nejtoxičtějšími prvky pro člověka (Pandey & Madhuri 2014).

Tabulka 3 Maximální denní dávky vybraných prvků za den (Pandey & Madhuri 2014)

Prvek	Maximální denní dávka ($\mu\text{g}\cdot\text{den}^{-1}$)	Prvek	Maximální denní dávka ($\mu\text{g}\cdot\text{den}^{-1}$)
As	15	Ni	250
Cd	5	Pd	100
Pb	10	Pt	100
Hg	15	V	250
Cr	250	Os	
Co	2500	Rh	Dohromady 100
Mn	2500	Ru	
Mo	250	Ir	

Pro míru toxicity je důležité v jaké formě se prvky nachází. Těžké kovy v elementární formě obvykle nepředstavují takové riziko jako jejich iontová forma. Například kationty rtuťnaté, kademnaté a stříbrné tvoří vysoce toxické komplexy, velmi nebezpečné pro fyziologické funkce (Nies 1999). Kovové formy těžkých kovů mají nízký toxický účinek. Organokovové formy jsou naopak vysoce toxické a organismem lépe vstřebatelné, například methyl rtuť či tetraethyl olovo. Oxidační číslo také ovlivňuje toxicitu, ale neexistuje zde žádná zákonitost jako je vyšší toxicita se stoupajícím oxidačním číslem. Například trojmocné sloučeniny arsenu jsou toxičtější než pětímocné sloučeniny arsenu, ale jednomocné sloučeniny rtuti jsou 200x méně toxické než dvojmocné sloučeniny rtuti (Cooksey 2012).

Rostlinami mohou být kromě kořenového systému těžké kovy přijímány i přímo z atmosféry (Zrůst 2003). Lošák et al. (2012) udávají, že mnohé z nich jsou pro samotné rostliny v nízké koncentraci neškodné, ale prostřednictvím potravního řetězce mohou ohrožovat zdraví člověka.

Ministerstvo životního prostředí uvádí indikační hodnoty rizikových prvků, a to arsenu, kadmia, olova a rtuti, které jsou uvedené v tabulce 4, při jejichž překročení může dojít k ohrožení zdraví lidí a zvířat.

Tabulka 4 Indikační hodnoty rizikových prvků (Ministerstvo životního prostředí 2016)

Rizikový prvek	Indikační hodnota (mg.kg ⁻¹ sušiny)
As	40
Cd	20
Pb	400
Hg	20

Těžké kovy do organismu vstupují potravou, pitnou vodou či vzduchem a ve většině případů vykazují chronickou toxicitu, jelikož jsou přijímány v malém množství během dlouhé časové periody (Pandey & Madhuri 2014).

3.2.1 Doporučené denní dávky

Doporučená denní dávka (DDD) se používá pro vyjádření potřebného denního příjmu živin, která pokrývá potřebu většiny zdravých jedinců v každé věkové kategorii. Tato denní dávka se může lišit s ohledem na různé faktory jako je zdravotní stav, pohlaví, věk či fyzická aktivita jedince. Doporučení denní dávka minerálů je množství, které je nezbytné pro udržení ideální koncentrace minerálů v krvi (Ministerstvo zdravotnictví 2009). Tyto hodnoty se od sebe mohou v jednotlivých zemích lišit a liší se i v průběhu let. V tabulce 5 je porovnání doporučené denní dávky dospělého zdravého člověka v České republice a v Evropské unii dle Světové zdravotnické organizace, kde je DDD označována jako RDI.

Na obalech potravin musí být označeno množství minerálních látek, pokud jejich množství převyšuje 15 % celkového množství doporučené denní dávky (Parlament České republiky 1997).

Tabulka 5 Porovnání DDD v České republice dle Ministerstvo zdravotnictví (2018) a RDI dle WHO & FAO (2004)

Prvek	Jednotka	DDD v ČR	RDI dle WHO
Ca	mg	800	1000
Cl	mg	800	3400
Cr	μg	40	120
Cu	mg	1	2
F	mg	3,5	3,5
Fe	mg	14	15
I	μg	150	150
K	mg	2000	3500
Mg	mg	375	350
Mn	mg	2	5
Mo	μg	50	75
P	mg	700	1000
Se	μg	55	35
Zn	mg	10	15

3.2.2 Minerální látky v kávě

Obsah minerálních látek v sušině kávy představuje 3 až 5 % hmotnosti. Nejvíce zastoupený prvek je draslík, který představuje asi 40 % celkového obsahu minerálních látek a je následován v menším množství vápníkem, hořčíkem, fosforem a sírou (Dos Santos & Oliveira 2001).

Technologie zpracování kávy má vliv na konečném obsahu minerálů v kávě. Obsah je ovlivněn růstovými podmínkami jakými jsou země původu, použití hnojiv či zralost zrn, dále je ovlivněn zpracováním suchou či mokrou cestou, fermentací plodů kávy či pražení kávy, což je patrné z výsledků v tabulce 6 (Filho et al. 2007; Duarte et al. 2010; Singh et al. 2020). Filho et al. (2007) uvádí, že vyšší koncentraci v pražené kávě ve srovnání se zelenou kávou mají prvky draslík, sodík, vápník, hořčík a železo. Prvkové složení je odlišné i u jednotlivých odrůd káv, káva arabica a káva robusta se liší v prvkovém složení, například měď a fosfor jsou více zastoupeny v kávě robusta (Martín et al. 1999; Wei et al. 2012; Cagliani et al. 2013). V konvenčně používaných hnojivech jsou obsaženy prvky baryum, hliník, kadmium, chrom, nikl a olovo, které přechází do rostliny a následně i do plodů. Na farmách s ekologicky pěstovanou kávou jsou používána hnojiva s mědí, chromem, zinkem, manganem a niklem (Dos Santos et al. 2010). Ke zvýšení obsahu hliníku v kávě může docházet i prostřednictvím obalu (Vega-Carrillo et al. 2002). Při domácí přípravě nápoje ze zrnkové kávy je nejméně 90 % minerálních látek extrahováno do nápoje, při přípravě z instantní kávy přechází 99 % minerálních látek do nápoje (Clarke et al. 1985).

Tabulka 6 Koncentrace prvků ve vzorcích kávy v jednotkách mg.kg⁻¹, stanoveno pomocí PIXE (Singh et al. 2020)

GCBR – zelená kávová zrna robusty, RCBR – pražená kávová zrna robusty, RFC – filtrát kávy z robusty, GCBA – zelená kávová zrna arabicy, RCBA – pražená kávová zrna arabicy, AFC – filtrát kávy z arabicy

Prvek	GCBR	RCBR	RFC	GCBA	RCBA	AFC
P	163 ± 26	329 ± 33	381 ± 31	328 ± 30	222 ± 57	378 ± 34
S	329 ± 8	355 ± 10	445 ± 10	523 ± 10	261 ± 0.26	451 ± 11
Cl	77 ± 4	90 ± 6	114 ± 6	207 ± 6	77 ± 5.2	186 ± 6
K	24170 ± 24	25463 ± 30	28328 ± 25	29967 ± 27	19548 ± 25	27580 ± 30
Ca	2804 ± 39	1599 ± 42	1818 ± 45	3732 ± 48	1452 ± 34	2111 ± 46
Sc	12 ± 3	3 ± 0.1	4 ± 2	16 ± 4	9 ± 2	8 ± 3
Cr	6 ± 0.8	139 ± 2	5 ± 0.8	3 ± 1	3 ± 1	4 ± 1
Ti	9 ± 1	9 ± 1.4	18 ± 1	15 ± 1.3	9 ± 1	23 ± 1
Mn	12 ± 0.8	117 ± 2	12 ± 0.9	28 ± 1	15 ± 1	21 ± 1
Fe	131 ± 1.5	819 ± 4	195 ± 1.9	147 ± 1.4	108 ± 1.7	226 ± 2.4
Cu	34 ± 1	18 ± 1	14 ± 0.8	42 ± 1	12 ± 0.9	15 ± 1.1
Zn	9 ± 1	8 ± 1	6 ± 0.9	11 ± 1	5 ± 0.8	5 ± 1
Rb	28 ± 3	28 ± 4	31 ± 3.7	26 ± 3	16 ± 6	17 ± 4
Sr	15 ± 3	11 ± 4	0	12 ± 4	6 ± 3	0
Se	0	0	14 ± 3	3 ± 0.8	0	0
Ni	4 ± 0.6	5 ± 0.8	3 ± 0.81	3 ± 0.7	1 ± 0.5	1 ± 0.78

Studie Oliveira et al. (2015) ukázala, že konzumace jednoho šálku espressa pokrývá doporučený denní příjem minerálů, a to od 0,04 % železa do 8,73 % draslíku. Díky prvkovému profilu byly odhaleny mezikontinentální a intrakontinentální rozdíly. Kávy z Jižní Ameriky měly průměrně nejvyšší koncentrace prvků kromě vápníku a kávy ze Střední Ameriky měly průměrně nejnižší koncentrace prvků kromě manganu. Mangan vykazoval významné rozdíly ($p < 0,05$) mezi všemi zeměmi a spolu s vápníkem byl stanoven jako nejlepší prvkový deskriptor země původu. Koncentrace manganu byla nejvyšší u vzorků kávy z Jižní Ameriky, poté Oceánie a Asie a nejnižší koncentrace manganu byla nalezena u vzorků káv z afrických zemí. Naopak nejvyšší koncentrace vápníku měly vzorky afrických káv, následovány vzorky z Asie, Jižní Ameriky a ve vzorcích káv z Oceánie bylo nalezen nejnižší množství vápníku.

3.2.3 Charakteristický obsah prvků dle země původu

Stanovení zeměpisného původu potravinářských výrobků je aktuálním tématem v oblasti falšování potravin. Falšování potravin není pouze současným jevem, ale je známo historicky a může být i životu nebezpečné (Ellis & Goodacre 2016). Potřeba nových rychlých analytických metod pro analýzu potravin vyvolala vývin spektrometrických metod jako je Ramanova spektroskopie, infračervená spektrometrie s Fourierovou transformací (FTIR) či blízká infračervená spektroskopie (NIRS) používané při odhalování falšování potravin (Medina & Laine 2011).

V České republice patří mezi nejčastěji falšované potraviny víno, destiláty, med, kakao a čokoláda. Bylo zaznamenáno více způsobů falšování, a to přítomnost nedeklarované složky, nastavení potraviny levnější složkou a klamavé označení způsobu produkce a země původu (SZPI 2015).

Káva byla dříve nastavována pomocí pražené pšenice, čekanky, fazolí, žaludů, bramborové či žitné mouky a pro dodání aroma a barvy se používal karamel (Ellis et al. 2012). V dnešní době je nejběžnějším falšováním kávy klamavé označení země původu.

Pro sledování původu plodiny je vhodné použít stanovení prvků v plodině, které je odrazem minerálního složení půdy a prostředí ve kterém rostlina vyrůstala. Stanovení organických látek či vitaminů je u kávy nevhodné z důvodu kombinace jejich nestability a dlouhodobého skladování kávových zrn před distribucí (Esechie 1992). Studie Habte et al. (2016) na základě tří druhů analýz ukázala, že mikroprvky a stopové prvky jsou nejlepšími deskriptory pro meziregionální diferenciaci vzorků káv.

Prvky je možné rozdělit do dvou skupin, prvky s významně odlišnými koncentracemi na základě země původu a prvky bez významných nebo žádných detekovatelných odchylek koncentrací. Jako nejvhodnější prvek pro stanovení původu zelené či pražené kávy dle elementárního složení je mangan. Při analýze káv z 8 zemí původu v 84 % případů vykazoval statisticky významný rozdíl v koncentracích. Dále jsou mezi vhodné prvky pro analýzu země původu řazeny vápník, kobalt, měď, cesium, sodík či rubidium (Krivan et al. 1993; Martín et al. 1999; Oliveira et al. 2015).

Stanovení prvkového složení plodin je možné použít pro sestavení tzv. fingerpringingu pěstební oblasti, tedy pro sestavení charakteristického chemického složení pěstební oblasti. Charakteristický prvkový profil je možné použít pro sledování původu nelegálně pěstovaných plodin, ze kterých se vyrábí drogy jako jsou heroin či kokain. Je možné lokalizovat farmy,

kde se zakázané plodiny pěstují, jejich činnost ukončit a zastavit tak nelegální obchod s drogami. Na některých místech sousedí kávové farmy s drogovými farmami, někteří pěstitelé maskují pěstování drog pěstováním kávy. Káva je pro trasování původu drog vhodná, jelikož je pěstována ve stejných geografických oblastech, vyžaduje stejné klima a půdu pro pěstování (Sun et al. 2013).

Studie Barbosa et al. (2014) ukázala, že konvenčně pěstovaná káva obsahuje vyšší koncentrace prvků než káva pěstována ekologicky. Prvky obsažené v hnojivech a postřicích používaných při konvenčním způsobu pěstování, například baryum či kadmium, přecházejí do rostliny. Z toxických a potenciálně toxických prvků se vyšší hladina koncentrace v konvenčně pěstované kávě prokázala u hliníku, uranu, ceru, lanthanu, thoria, ytterbia a zirkonia. Studie Santos et al. (2004) ukázala, že není žádné zdravotní riziko expozice kadmia a olova prostřednictvím konzumace kávy. Káva je důležitým zdrojem prvků mědi, manganu a zinku, které jsou nezbytné pro metabolické procesy v organismu (Habte et al. 2016).

Pro analýzu byly vybrány čtyři významné pěstitelské země kávy – Brazílie, Etiopie, Indie a Kolumbie. Jejich specifické prvkové složení je v tabulce 7 (Anderson & Smith 2002; Zaidi et al. 2006; Ashu & Chandravanshi 2011; Pohl et al. 2012).

Brazílie

Brazilská federativní republika je tvořena 26 státy, zaujímá rozlohu přes 8 500 000 m² a má celkem tři klimatická pásma, a to rovníkové, subtropické a tropické. Kávy vypěstované v jednotlivých oblastech tak mohou být velmi rozdílné svým chemickým složením i svou chutí (James 1932). V Brazílii se ročně vypěstuje přes 39,3 milionů žoků kávy, což je více než třetina celosvětové produkce. Pěstuje se zde káva arabica i robusta. Brazílie je na prvním místě v produkci i vývozu kávy na světě, avšak v brazilské ekonomice káva zaujímá až druhé místo po ropě (Dos Santos & Oliveira 2001).

V Brazílii je 13 hlavních oblastí pro pěstování kávy a jsou jimi Minas Gerais, São Paulo, Bahia, Espírito Santo, Paraná, Rondônia, Rio de Janeiro, Ceará, Goiás, Pernambuco, Distrito Federal, Acre a Mato Grosso (BSCA 2020). Minas Gerais je největší region zaměřený na pěstování kávy v republice a pokrývá téměř 50 % celkové brazilské produkce. Kvalitu kávy a certifikaci kávy provádí Brazilská asociace kávového průmyslu ABIC (Dos Santos et al. 2019).

Studie Barbosa et al. (2014) analyzující celkem 54 brazilských káv, 20 káv vypěstovaných ekologicky a 34 káv vypěstovaných konvenčně, ukázala, že koncentrace prvků chromu, kobaltu, mědi, manganu, stroncia a zinku mají v místních kávách shodné koncentrace, které se shodují se studií Zaidi et al. (2006).

Etiopie

Etiopie je největším africkým vývozcem kávy (ICO 2020) a je kolébkou kávy arabica, jejíž divoká odrůda současně roste pouze v Etiopii, Keni a Ugandě (Koebler 2013). Káva je v zemi hlavní zemědělskou komoditou a v roce 2015 tvořila živobytí pro přibližně 4,5 milionů tamějších zemědělců (Hirons et al. 2018). Organizace Ethiopia Trademarking and Licensing Initiative se snaží zajistit etiopským pěstitelům kávy vyšší a předvídatelnější příjmy a tím podporuje trh s kávou (Teuber 2010).

Etiopie je rozdělena na jedenáct provincií pěstujících kávu, a to jsou Bale, Bebeke, Gojjam, Harar, Illubabor, Jimma, Limu, Nekemte, Sidamo, Tepi a Yirgacheffe. Koncentrace prvků hořčíku, fosforu, draslíku, síry a vápníku má v uvedených provinciích velmi podobné hodnoty. Ostatní prvky se v jednotlivých provinciích Etiopie liší (Habte et al. 2016).

Indie

Indie je po Vietnamu druhým největším asijským vývozcem kávy (ICO 2020). Pěstuje se zde káva robusta i arabika, robusta má 60% zastoupení. Největším producentem kávy je horská oblast Maisúr. 90 % produkce kávy jde na export do cizích zemí (Mohan et al. 2014). Indická káva je známá svým zpracováním, monzumováním, kde se využívá horké počasí a vlhký vítr ke zvětšení a zesvětlení zrn – simulují se tak podmínky z dob, kdy káva plula do Evropy přes půl roku a klima během přepravy tvořilo část nezaměnitelné chuti (Murthy & Manonmani 2009).

Studie Zaidi et al. (2006) ukázala, že v indické kávě je nejvyšší koncentrace selenu, kobaltu, chromu a železa oproti brazilské, kolumbijské a keňské kávě. Ani jeden z těchto prvků nepřekročil doporučenou denní dávku. Indická káva má vyšší průměrné koncentrace prvků vápníku, hořčíku, sodíku, fosforu, železa a manganu než je průměrná koncentrace asijských káv a nejvyšší koncentrace vápníku, hořčíku, sodíku, fosforu a manganu z asijských zemí produkujících kávu. Vyšší koncentraci vápníku než indická káva má pouze etiopská káva, vyšší koncentraci sodíku má kolumbijská káva, koncentrace hořčíku je shodná jako koncentrace jihoamerických káv a koncentrace manganu je v indické kávě nejvyšší z analyzovaných káv ve studii Oliveira et al. (2015).

Kolumbie

Kolumbie je druhým největším vývozcem kávy z amerických států, třetím celosvětovým vývozcem po Brazílii a Vietnamu, a zároveň největším celosvětovým vývozcem kávy arabica. Pěstování kávy zde zajišťuje příjem pro více než půl milionu malých rodinných farem s rozlohou do tří hektarů. V roce 1927 byla založena nezisková organizace Národní federace pěstitelů kávy v Kolumbii, která podporuje produkci a vývoz kolumbijské kávy (Arana et al. 2015).

Kolumbie je rozdělena na regiony pěstující kávu, a to na Středozápadní region zahrnující regiony Antioquia, Caldas, Quindío, Risaralda, Tolima a Valle; Východní region kam spadá Boyacá, Cundinamarca, Norte de Santander a Santander; Jižní oblast s regiony Cauca, Nariño a Huila a Severní region, který zahrnuje regiony Cesar, La Guajira a Magdalena. Středozápadní oblast a Jižní oblast společně představují 79 % celkové osázené kávovníkové plochy a tvoří 88 % produkce kolumbijské kávy (Giovannucci et al. 2002).

Prvkové složení kávy z Kolumbie je podobné prvkovému složení kávy z Kuby (Krivan et al. 1993) a s brazilskou kávou má shodné koncentrace železa (Oliveira et al. 2015). Oleszczuk et al. (2007) ve své studii uvedli, že pomocí stanovení koncentrace manganu v zelené kávě je možné odlišit vzorky káv z Kolumbie a Kuby.

Tabulka 7 Obsah prvků v kávě zelené, pražené a instantní a v kávě z Brazílie, Etiopie, Indie a Kolumbie

U prvků s vynechanými hodnotami nebyl prvek stanovován (Anderson & Smith 2002; Zaidi et al. 2006; Ashu & Chandravanshi 2011; Pohl et al. 2012)

Prvek	Jednotka	Země původu kávových zrn						
		Zelená káva (Pohl 2012)	Pražená mletá káva (Pohl 2012)	Instantní káva (Pohl 2012)	Brazílie (Zaidi 2006)	Etiopie (Ashu 2011)	Indie (Zaidi 2006)	Kolumbie (Anderson 2002)
Ba	mg.kg ⁻¹	1,6–10,2	0,8–10,1	3,4–3,9	4,4 ± 0,3		1,7 ± 0,1	
Br	mg.kg ⁻¹	0,3–1,8	0,7–8,5		2,0 ± 0,2		4,3 ± 0,4	
Ca	mg.kg ⁻¹	790–1870	490–2200	110–2650		945 ± 65		1129 ± 150
Cd	mg.kg ⁻¹	0,70–0,75	< 0,1	0,02–0,031		< mez detekce		
Co	mg.kg ⁻¹	0,02–0,62	0,06–1,90	0,04–14,2	0,2 ± 0,017	1,6 ± 0,05	0,241 ± 0,02	
Cr	mg.kg ⁻¹	< 0,08–1,01	0,02–1,29	0,002–52	0,029 ± 0,002		0,089 ± 0,008	
Cs	mg.kg ⁻¹	0,02–0,19	0,016–0,133		0,102 ± 0,008		0,026 ± 0,002	
Cu	mg.kg ⁻¹	7,2–76,9	0,4–30,1	0,3–12,9		14 ± 0,6		17,2 ± 1,7
Fe	mg.kg ⁻¹	24,8–108	12–617	6,3–451	34,7 ± 2,9	52 ± 4	72,0 ± 5,9	17 ± 3
Hg	µg.kg ⁻¹		6,0–16		6 ± 1		9 ± 1	
K	mg.kg ⁻¹	12100–21400	11400–29100	18700–61500	24000 ± 2000	14488 ± 467	17000 ± 1000	19170 ± 1380
Mg	mg.kg ⁻¹	140–2090	750–3100	840–5540		1964 ± 78		2268 ± 140
Mn	mg.kg ⁻¹	13,4–57,7	6,6–320	3,6–49,5	48,6 ± 3,9	23 ± 0,9	24,6 ± 2,1	38 ± 10
Na	mg.kg ⁻¹	2,4–118	6,6–1467	30–6670	7,6 ± 0,6	484 ± 12	21,3 ± 1,8	40,1 ± 11
P	mg.kg ⁻¹	1410–2200	190–4030	350–4290				1980 ± 200
Pb	mg.kg ⁻¹	< 0,01	< 2,6	0,09–0,91		< mez detekce		
Rb	mg.kg ⁻¹	13,5–73,0	12,3–34,0		12,3 ± 1,1		18,3 ± 1,6	
Sc	µg.kg ⁻¹	0,53–1,92	8–180		8 ± 1		14 ± 2	
Sr	mg.kg ⁻¹	1,3–18,0	1,1–11,9					
Zn	mg.kg ⁻¹	3,6–61,3	1,2–803	1,8–15,0	10,7 ± 0,9	15 ± 0,8	5,1 ± 0,4	8,01 ± 1,8

3.2.4 Metody stanovení prvků v kávě

Pro analytické stanovení obsahu vybraných prvků ve vzorcích kávy existuje mnoho postupů a metod, které charakterizují prvky kvalitativně či kvantitativně, a jsou obvykle destruktivní. V České republice upravuje metody zkoušení kávy norma ČSN 580113 Změna 3, která stanovuje postup při odběru vzorků a při smyslovém, fyzikálním, fyzikálně chemickém a mikroskopickém zkoušení kávy.

Analytické metody je možné dělit na chemické a instrumentální. Mezi chemické metody stanovení prvků v kávě patří volumetrické stanovení a gravimetrické stanovení. Mezi instrumentální metody patří separační metoda plynová chromatografie s hmotnostním detektorem - GC-MS (Jumhawan et al. 2013), elektrochemické voltametrické stanovení (Hevia et al. 2015), z optických metod je stanovení možné pomocí atomové absorpční spektroskopie - AAS (Jarošová et al. 2014; Gogoasa et al. 2017) či emisní spektroskopie - AES (Dos Santos & Oliveira 2001), blízké infračervené spektrometrie - NIRS (Esteban-Díez et al. 2004), Ramanovy spektroskopie (El-Abassy et al. 2011) či nukleární magnetické rezonance - NMR (Cagliani et al. 2013) a z metod jaderné chemie stanovení pomocí fotonové či neutronové aktivační analýzy - PAA a NAA (Kriván et al. 1993). Tyto aktivační metody jsou v České republice využívány již více než 50 let a patří mezi tzv. přímé metody, využívané pro enviromentální výzkum, geochemii a kosmochemii, biomedicínské studie, zemědělství, výživu, materiálový výzkum, archeologii a výzkum kulturního dědictví, dále se využívá ke kontrole kvality při přípravě referenčních materiálů (Kučera 2018). Pro prvkové složení povrchových vrstev vzorku slouží metoda PIXE (prvková analýza využívající protonového svazku) (Singh et al. 2020).

Instrumentální fotonová aktivační analýza (IPAA) je nedestruktivní radioanalytická metoda, kterou lze na rozdíl od klasických analytických metod, které jsou destruktivní, použít pro prvkovou analýzu kávy. Pomocí IPAA lze stanovit vybrané prvky v mleté kávě. IPAA je radioanalytická metoda, která využívá záření emitované jádery atomů stanovovaných prvků po aktivaci ke kvalitativnímu i kvantitativnímu stanovení prvků přítomných ve vzorku. Laboratoře Ústavu jaderné fyziky AV ČR, v.v.i díky mikrotronu běžně využívají IPAA pro prvkovou charakterizaci biologických a geologických vzorků a vzorků životního prostředí (Krausová 2015).

3.3 Fotonová aktivační analýza

Aktivační metody jsou známy od 30. let 20. století. Nejzastoupenější je neutronová aktivační analýza, *Neutron Activation Analysis*, (NAA) využívající zejména záchyt neutronu (n,γ). Ve fotonové aktivační analýze, *Photon Activation Analysis*, (PAA) dominuje jaderná reakce (γ,n). Dále je využívána metoda aktivace nabitými částicemi (např. p, d, α) *Charged Particle Activation Analysis* (CPAA).

Fotonová aktivační analýza lze dle průběhu rozdělit na instrumentální PAA a s využitím radiochemické separace prvků či skupin prvků tzv. radiochemickou PAA. Fotonová aktivační analýza je doplňkovou metodou k neutronové aktivační analýze a je řazena mezi jaderné analytické metody (Krausová 2015).

První experimenty s fotojadernými reakcemi v PAA se poprvé uskutečnily již v roce 1934 (Chadwick & Goldhaber 1935), ale mnoho publikací pochází až z 60. let (Lutz & De Soete 1968; Lutz 1969) a 70. let (Lutz 1971; Segebade et al. 1977). Segebade et al. (1988) publikoval encyklopedii fotonové aktivační analýzy, kde shrnuje prozatimní teoretické a experimentální poznatky metody. V České republice je průkopníkem této metody Řanda et al. (1981), který popsal nedestruktivní analýzu minerálních materiálů.

Fotonová aktivační analýza se obvykle využívá právě pro analýzu geochemických vzorků, ale i pro analýzu enviromentálních a biologických vzorků (Krausová 2015). Tato metoda je založena na reakcích prvků, které jsou přítomné ve vzorku, aktivovaných ozářením tokem vysokoenergetických fotonů. Používá se převážně brzdné záření (*bremmstrahlung*), které vzniká konverzí svazku elektronů urychlených lineárním či cyklickým urychlovačem po dopadu na chlazený terč z těžkého, tepelně odolného kovu o vysokém protonovém čísle, např. platina či wolfram (Majer et al. 1985; Handbook 2000). Jádra prvků částečně absorbují tok fotonů a jsou excitována na hladiny vysoké energie. Takto vzniklé radionuklidy většinou emitují záření γ s čárovým charakterem energetického spektra, které se hodí pro spektrometrické účely. Dříve používané scintilační detektory z krystalů jodidu sodného aktivovaného thaliem NaI(Tl) byly vystřídány dnes používanými polovodičovými detektory z monokrystalů superčistého germania (HPGe) (Řanda et al. 1981; Segebade & Berger 2008).

Účinný průřez reakce σ charakterizuje pravděpodobnost interakce fotonu s jaderným terčem (prvkem přítomným v analytu) a je závislý na pravděpodobnosti jaderné absorpce. Účinný průřez reakce (γ, n) je charakterizován obrovskou dipólovou rezonancí, která má tvar Gaussovy křivky. Nejlépe analyticky využitelná je reakce (γ, n) dominantní, při níž je energie fotonů nad vazebnou energii nukleonů (10–25 MeV), a v majoritní většině případů vznikají neutron deficitní jádra (Krausová 2015). Všechny fotojaderné reakce jsou endoergické a jsou doprovázené elektronovým záchytem (EC) nebo emisí pozitronu (β^+). Přeměna doprovázená elektronovým záchytem je doprovázena nejen emisí záření γ , ale i charakteristickým zářením nově vznikajícího produktu. Přeměna doprovázená emisí pozitronu je doprovázena emisí nespecifického záření γ o energii 511 keV vznikající anihilací pozitronu, a je převládající u lehkých a středně těžkých prvků. Reakce (γ, n) umožňuje i stanovení lehkých prvků jakými jsou uhlík, dusík, kyslík a fluor (Segebade et al. 1988; Segebade & Berger 2008).

3.3.1 Instrumentální fotonová aktivační analýza

Instrumentální fotonová aktivační analýza je nedestruktivní metoda, pracovně nejjednodušší a nejvyužívanější formou PAA. IPAA se uplatňuje při analýze vzorků, u nichž je možné výběrem vhodných parametrů ozařování a měření (např. energetický práh reakce, doba ozařování) případné interference ostatních prvků ve spektrech korigovat nebo eliminovat. Tato metoda umožňuje stanovit téměř 40 prvků. Z obrázku 2 je zřejmé, že je možné stanovit radionuklidy s krátkými poločasy přeměny, krátkodobá IPAA (ST IPAA), a radionuklidy s dlouhými poločasy přeměny, dlouhodobá PAA (LT IPAA). Některé prvky je možné stanovit metodou IPAA krátkodobou i dlouhodobou (Krausová 2015).

H																			He
Li	Be																		
Na	Mg																		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Ra		
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt											

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Obrázek 2 Přehled prvků stanovitelných ST, LT či jejich kombinací ST+LT na mikrotronu MT-25 (Krausová 2015)

3.3.1.1 Absolutní metoda výpočtu

Rovnice jaderné aktivace (1) popisuje aktivitu A vznikající při ozařování fotony za předpokladu, že vzniklý radionuklid je detegován spektrometrickým měřením záření γ . Koncentraci frakce analytu v analytu lze vypočítat absolutní metodou (Segebade & Berger 2008).

$$A = \frac{mSDC}{M} N_A \theta \int_{E_{th}}^{E_{max}} \phi(E) \sigma(E) dE, \quad (1)$$

kde m je hmotnost vzorku, M je molární hmotnost, N_A je Avogadrova konstanta, θ je relativní izotopové zastoupení aktivovaného izotopu v přirozené směsi, E_{th} je prahová energie dané reakce, E_{max} je maximální energie brzdného záření, $\phi(E)$ je energeticky závislá hustota toku fotonů, $\sigma(E)$ je energeticky závislý účinný průřez dané fotoreakce, $S = 1 - \exp(-\lambda t)$ je saturační faktor, kde λ je přeměnová konstanta, která je vázána s poločasem přeměny $T_{1/2}$ vztahem $\lambda = \ln 2 / T_{1/2}$, t_i je doba ozařování, $D = \exp(-\lambda t_d)$ je rozpadový faktor, kde t_d je doba vymírání (doba od skončení ozařování do začátku měření), $C = (1 - \exp(-\lambda t_c)) / (\lambda t_c)$ je faktor, jímž se koriguje rozpad nuklidu během doby měření t_c .

3.3.1.2 Výpočet čisté naměřené plochy fotopíku

Vztah mezi obsahem stanovovaného prvku v analytu a aktivitou produktu aktivace analytického radionuklidu (A) po ozáření fotonovým zářením a naměřenou spektrometrickým měřením zářením γ vyjadřuje rovnice (2) (Segebade & Berger 2008).

$$P(t_i, t_d, t_c) = \frac{mSDCt_c}{M} N_A \theta \eta h \int_{E_{th}}^{E_{max}} \phi(E) \sigma(E) dE, \quad (2)$$

kde $P(t_i, t_d, t_c)$ je čistá naměřená plocha fotopíku, m je hmotnost vzorku, M je molární hmotnost, N_A je Avogadrova konstanta, θ je relativní izotopové zastoupení aktivovaného izotopu v přirozené směsi, E_{th} je prahová energie dané reakce, E_{max} je maximální energie brzdného záření, $\phi(E)$ je energeticky závislá hustota toku fotonů, $\sigma(E)$ je energeticky závislý účinný průřez dané fotoreakce, $S = 1 - \exp(-\lambda t)$ je saturační faktor, kde λ je přeměnová konstanta, která je vázána s poločasem přeměny $T_{1/2}$ vztahem $\lambda = \ln 2 / T_{1/2}$, t_i je doba ozařování, $D = \exp(-\lambda t_d)$ je rozpadový faktor, kde t_d je doba vymírání (doba od skončení ozařování do začátku měření), $C = (1 - \exp(-\lambda t_c)) / (\lambda t_c)$ je faktor, jímž se koriguje rozpad nuklidu během doby měření t_c .

3.3.1.3 Relativní metoda výpočtu

Častěji než výše uvedená absolutní metoda výpočtu je používána relativní metoda, jež zanedbává parametry relativní izotopové zastoupení aktivovaného izotopu v přirozené směsi - $\phi(E)$, a energeticky závislý účinný průřez dané fotoreakce - $\sigma(E)$.

Obsah analytu ve vzorku c_{vz} je vyjádřen rovnicí (3) za předpokladu, že vzniklý radionuklid je detekován spektrometrickým měřením záření γ a zároveň jsou se vzorky za stejných podmínek ozařovány kalibrační standardy s přesně definovaným obsahem stanovovaných prvků.

$$c_{vz} = c_{st} \frac{P_{vz}(wSDCQt_c)_{st}}{P_{st}(wSDCQt_c)_{vz}}, \quad (3)$$

kde c_{vz} je obsah analytu ve vzorku, c_{st} je obsah analytu ve standardu, P je plocha píku po odečtení pozadí, w je hmotnost analyzovaného podílu, S je saturační faktor, D je rozpadový faktor, C je faktor korigující rozpad nuklidu během doby měření t_c , Q je mírou dávky fotonového záření, index vz identifikuje vzorek, index st identifikuje kalibrační standard.

Uvedená rovnice (3) platí v případě, že gradient toku fotonů mezi pozicí vzorku a pozicí standardu je zanedbatelný či korigovaný použitím vhodného monitoru toku fotonů při ozařování, případně integrátorem proudu. Tento postup je možné použít pro stanovení prvků, pro které byly připraveny standardy (Krausová 2015).

Kontrola kvality (QC) stanovení je zabezpečena různými postupy, mezi které patří souběžná analýza studovaného materiálu a certifikovaného referenčního materiálu, monitorování toku fotonů aktivačními monitory, použití vnitřních standardů či jiné sofistikované postupy. Tyto postupy mohou snížit případný vliv zdrojů chyb a případné nehomogenity fotonového svazku (Segebade & Berger 2008).

Jak je patrné z výše uvedených rovnic (1), (2) a (3), citlivost stanovení prvků metodou IPAA je závislá na mnoha parametrech. Mezi tyto parametry patří podmínky měření, tedy geometrie měření, účinnost detektoru, doba vymírání vzorku, doba měření vzorku; parametry ozařování, tedy energie ozařování a čas ozařování; parametry analytu, tedy účinný průřez reakce, relativní izotopové zastoupení v jaderném terči, přeměnová konstanta, energie

analytických linek. Vliv na citlivost stanovení mají i faktory, které nejsou v uvedených rovnicích zahrnuty. Jsou jimi například vliv velikosti vzorku a složení matrice (Krausová 2015).

3.3.1.4 Nejistota měření

Analytické metody měření jsou zatíženy chybami různých řádů. Je důležité tyto chyby charakterizovat, kvantifikovat a zvolit potřebné kroky pro minimalizaci jejich vlivu. Pro správnou interpretaci naměřených výsledků je třeba vymezit jejich hranice formou nejistoty. Nejistota je parametr charakterizující rozptyl hodnot, které by mohly být přisuzovány ke sledované veličině, tedy vymezuje hranice, v nichž je výsledek považován za přesný a správný. Nejistota výsledku měření se vyjadřuje ve dvou formách, a to:

- standardní nejistota $u(x_i)$ – vyjadřuje se ve formě směrodatné odchylky σ
- kombinovaná standardní nejistota $u_c(y)$ – získá se sloučením standardní nejistoty z jednotlivých zdrojů u_i v průběhu celého analytického postupu.

Zdroje standardní nejistoty u_i v aktivační analýze je možné dělit dle jednotlivých kroků analýzy do 4 kategorií:

- nejistota u_1 – příprava vzorku a komparátoru (standardu, monitoru fotonového toku)
- nejistota u_2 – ozařování vzorku
- nejistota u_3 – spektrometrské měření γ záření
- nejistota u_4 – radiochemické separace (pokud je při analýze prováděna) (IAEA 2004).

Kombinovaná standardní nejistota u_c daná vztahem (4) vytváří interval, který pokrývá skutečnou hodnotu měřené veličiny pouze s poměrně malou pravděpodobností správného výsledku (necelých 70 %), kde jsou jednotlivé složky nejistoty vyjádřené jako relativní standardní odchylka.

$$u_c = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + u_4^2}, \quad (4)$$

Z důvodu poměrně malé pravděpodobnosti správného výsledku se pro analytické účely vyjadřuje celková nejistota jako rozšířená kombinovaná nejistota U , která je dána rovnicí (5) a určí se vynásobením hodnoty kombinované standardní nejistoty u_i faktorem rozšíření k .

$$U = k \cdot u_c. \quad (5)$$

V případě normálního rozdělení pro úroveň spolehlivosti asi 95 % je $k = 2$, v případě normálního rozdělení pro úroveň spolehlivosti asi 99,7 % je $k = 3$ (EURACHEM 2012).

3.3.1.5 Výhody a nevýhody IPAA

Každá analytická metoda má své výhody i nevýhody. Před analýzou je vždy nutné vyhodnotit klady a zápory analytických metod a vybrat tu metodu, která bude pro stanovení nejvhodnější.

Instrumentální fotonová aktivační analýza má tyto výhody:

- stanovení lehkých prvků ($Z < 11$), které jsou jinými metodami těžko stanovitelné, ve stopových až ultrastopových koncentracích (ppm),
- snadná ověřitelnost správnosti výsledku,
- nízké detekční limity,
- nízká aktivace matrice a z toho vyplývající menší radiační zatížení pracovníků,
- u krátkodobé varianty expresní charakter,
- známé teoretické základy umožňující jednoduché vyhodnocení zdrojů nejistot,
- vysoká pronikavost vysokoenergetického záření umožňující ozáření malých vzorků (mg) i větších vzorků (> 100 g) homogenním zářením,
- eliminace nežádoucích interferencí pomocí zvolení vhodné energie urychlených elektronů, doby ozařování, vymírání a měření,
- praktická nepřítomnost blanku,
- nedestruktivní způsob,
- snadné zpracování vzorků,
- prahový charakter reakcí,
- u řady prvků tzv. self-verification princip – stanovení několika jadernými reakcemi,
- nenáročné na použití chemikálií.

Instrumentální fotonová aktivní analýza má i své nevýhody, jsou jimi:

- některé fotojaderné produkty jsou čisté pozitronické zářiče, které mají jiný způsob identifikace,
- nižší hodnoty účinných průřezů a tedy nižší citlivost,
- určení poločasu přeměny z rozpadové křivky,
- prahový charakter reakcí,
- sofistikovaný měřicí přístup,
- nevhodnost pro velmi malé vzorky (< 1 mg),
- pracnost a časová náročnost přípravy, ozařování a měření standardů.

Prahový charakter reakcí je možné zařadit mezi výhody i mezi nevýhody. Je možné jej s výhodou využít pro výběr vhodného prahu reakce, pod níž reakce neprobíhá a tudíž se neaktivují prvky, které nejsou předmětem analýzy (Řanda et al. 1981; Majer et al. 1985; Chvátil et al. 2008; Segebade & Berger 2008; Green et al. 2011).

3.3.2 Mikrotron MT-25

V roce 1981 byl zahájen provoz prvního československého mikrotronu MT-22, který byl zkonstruován na FJFI ČVUT v Praze ve spolupráci s JINR Dubna. Pro fotonovou aktivační analýzu byla k dispozici maximální energie svazku 22 MeV. Ve spolupráci s Ústavem nerostných surovin v Kutné Hoře byly prováděny analýzy vzorků zlatonosných rud. Z urychlovací komory byl vyveden kanál 10 MeV a instalován automatizovaný transportní a detekční systém, který byl na bázi 4 scintilačních detektorů. V Československu byl i druhý

mikrotron stejného typu, který byl nainstalován v Ústavu nerostných surovin v Kutné Hoře a do provozu byl uveden v roce 1989. V současné době není ani jeden z těchto dvou mikrotronů v provozu (Vognar et al. 2003).

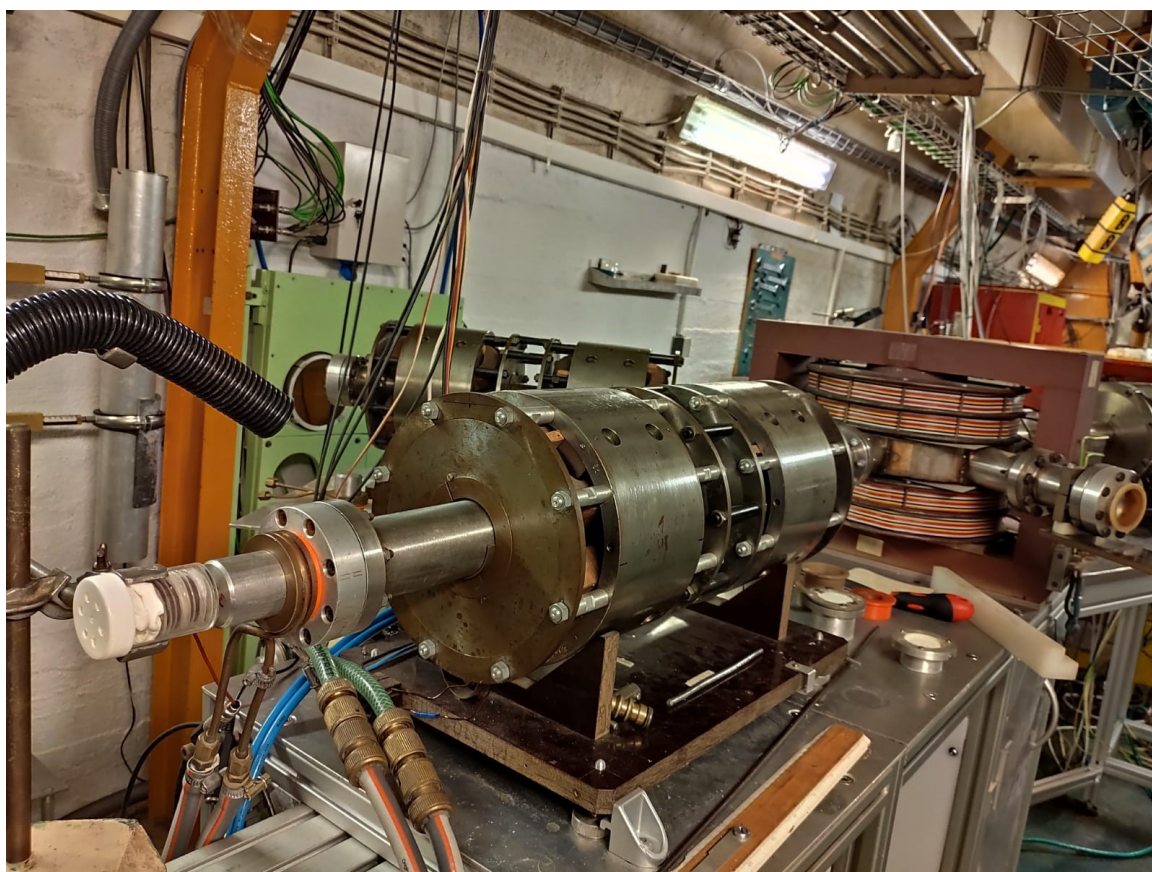
Po úspěšném desetiletém provozu byl mikrotron MT-22 nahrazen novým, tzv. bezkomorovým mikrotronem MT-25. V roce 2003 byl mikrotron MT-25 předán Ústavu jaderné fyziky AV ČR a byla zahájena jeho modernizace zaměřená na zlepšení parametrů mikrotronu jako je zvýšení středního proudu urychlených elektronů, kvalita paprskových a ozařovacích polí a dosažení lepší stability a spolehlivosti dlouhodobého provozu. V roce 2006 byl zahájen stabilní provoz mikrotronu MT-25 při průměrném proudu elektronů 20 μA a využití pro PAA ve větším měřítku bylo obnoveno (Vognar et al. 2003; Krausová 2015).

S využitím mikrotronu byly v ÚJF prováděny především geochemické studie, s použitím dvou aktivačních metod – Instrumentální neutronová a fotonová aktivační analýza v geochemickém studiu fonolitických a trachytických hornin Řanda et al. (2007) nebo studie Instrumentální neutronová a fotonová aktivační analýza vybraných geochemických referenčních materiálů (Mizera & Řanda 2010). Další rozvoj PAA umožnila rovněž inovace MT-25 (Krausová et al. 2013; Krist et al. 2014). V oblasti životního prostředí byl stanoven toxický fluor, obtížně stanovitelný klasickými analytickými metodami (Krausová et al. 2015). Nedestruktivní charakter IPAA také umožnil analýzy biologických vzorků zejména dusíku v obilí (Krausová et al. 2018; Mádlíková et al. 2018) nebo analýzu artefaktu kulturního dědictví – pravěkého náramku z depoziáře Muzea Karlovy Vary (Krausová et al. 2019).

Mikrotron MT-25 (viz obrázek 3) je vysokofrekvenční cyklický urychlovač elektronů s pevnou frekvencí a konstantním rovnoměrným magnetickým polem. Urychlování elektronů probíhá v rezonátoru dutiny vysokofrekvenční energií dodávanou vysokou pulzní silou magnetronu a jsou otáčeny ve vakuové komoře v kruhových trajektoriích s postupně se zvětšujícími se průměry, čímž získávají postupně vyšší energii. Elektrony mohou být extrahovány z jednotlivých oběžných drah pro dosažení požadované energie paprsku. Hlavní parametry mikrotronu MT-25 shrnuje tabulka 8. Zrychlený elektronový paprsek lze převést na vysokoenergetické fotonové záření na cíl, který je obvykle vyrobený z wolframu. Mikrotron je možné použít jako účinný zdroj vysokoenergetického fotonového záření pro použití při fotonové aktivační analýze. S vhodným sekundárním konvertorem lze mikrotron použít také jako zdroj neutronů vhodný mimo jiné pro analýzu aktivace neutronů (Krist et al. 2014).

Tabulka 8 Hlavní fyzikální parametry mikrotronu MT-25 (Chvátíl et al. 2008)

	Energetický rozsah	6–25 MeV
	Proud urychlených elektronů	20 μA
Vysokofrekvenční zdroj	Přeladitelný magnetron	2796 ± 5 MHz
	Výkon	5 MW
	Délka pulsu	3,5 μs
	Vlnová délka	10 cm
	Opakovací frekvence	423 s^{-1}
	Frekvence rezonátoru	2798 MHz
	Frekvence napájecích zdrojů	50 Hz
	Počet pracovišť	3
	Homogenní pole	pracoviště B
Elektronové pole	Velikost ve vzdálenosti 1 m od výstupového okénka	min. $20 \times 20 \text{ cm}^2$
	Homogenita	$\pm 5 \%$
	Dávkový příkon ve vzdálenosti 1 m	$25 \text{ Gy} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \mu\text{A}$
Fotonové pole	Velikost ve vzdálenosti 1 m od výstupového okénka	min. $20 \times 20 \text{ cm}^2$
	Homogenita	$\pm 5 \%$
	Dávkový příkon ve vzdálenosti 1 m	$0,2 \text{ Gy} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \mu\text{A}$



Obrázek 3 Mikrotron MT-25 v mikrotronové laboratoři ÚJF AV ČR, v.v.i

4 Metodika

Metodika práce zahrnuje přípravu analyzovaných vzorků kávy, jejich ozáření a detekci signálů jednotlivých prvků. Naměřené signály byly vyhodnoceny a statisticky zpracovány programem Statistica CZ 12 verze trial (USA).

4.1 Vzorky kávy

Pro analýzu byly vybrány kávy ze 4 světových oblastí pěstování kávy, a to z Brazílie, Etiopie, Indie a Kolumbie. Kávy byly vybrány od malých pražírén, ale i od velkých nadnárodních korporací prodávajících kávu po celém světě. Analyzováno bylo celkem 28 zrnkových kávy a 8 kávy z kapslí. Konkrétně bylo analyzováno 8 kávy z Brazílie, z čehož bylo 7 kávy zrnkových a 1 káva z kapsle; 9 kávy z Etiopie, z čehož bylo 8 kávy zrnkových a 1 káva z kapsle; 8 kávy z Indie, z čehož bylo 6 kávy zrnkových a 2 kávy z kapsle; a 11 kávy z Kolumbie, z čehož bylo 7 kávy zrnkových a 4 kávy z kapsle. S uvedenými vzorky byl analyzován jeden vzorek zrnkové kávy z Číny. V tabulce 9 je seznam vzorků s příslušnou zemí původu a pražírnu, je uvedeno, zda se jedná o zrnkovou kávu či kávu z kapsle a označení vzorků, pod kterými jsou uvedeny v Grafech 1–8. Označení se skládá z prvních tří písmen země původu, u kapslových kávy je doplněno písmeno K a pro rozlišení dvou shodných vzorků ze stejné oblasti a stejné pražírny je označení římskou číslicí, označení za pomlčkou končí prvními čtyřmi či pěti písmeny z názvu pražírny, odkud káva pochází.

Tabulka 9 Seznam analyzovaných vzorků
ČV = číslo vzorku, Z = zrnková káva, K = káva z kapsle

ČV	Pražírna	Původ	Typ	Označení	ČV	Pražírna	Původ	Typ	Označení
1	Longberry	Kolumbie	Z	Kol-Long	20	Coffeespot	Kolumbie	Z	Kol-Spot
2	Longberry	Indie	Z	Ind-Long	21	Coffeespot	Indie	Z	IndI-Spot
3	Longberry	Brazílie	Z	Bra-Long	22	Coffeespot	Indie	Z	IndII-Spot
4	Longberry	Etiopie	Z	Eti-Long	23	Coffeedream	Etiopie	Z	EtiI-Dream
5	Longberry	Čína	Z	Čín-Long	24	Coffeedream	Etiopie	Z	EtiII-Dream
6	Starbucks	Etiopie	Z	Eti-Star	25	Coffeedream	Brazílie	Z	BraI-Dream
7	Starbucks	Kolumbie	Z	Kol-Star	26	Coffeedream	Brazílie	Z	BraII-Dream
8	L'OR	Kolumbie	Z	Kol-L'Or	27	Coffeedream	Kolumbie	Z	KolI-Dream
9	L'OR	Brazílie	Z	Bra-L'Or	28	Coffeedream	Kolumbie	Z	KolII-Dream
10	Tchibo	Etiopie	Z	Eti-Tchib	29	Coffeedream	Indie	Z	Ind-Dream
11	Tchibo	Brazílie	Z	Bra-Tchib	30	Nespresso	Etiopie	K	EtiK-Nesp
12	APe	Etiopie	Z	EtiI-APe	31	Nespresso	Kolumbie	K	KolK-Nesp
13	APe	Etiopie	Z	EtiII-APe	32	Nespresso	Indie	K	IndK-Nesp
14	APe	Brazílie	Z	Bra-APe	33	Tchibo	Brazílie	K	BraK-Tchib
15	APe	Kolumbie	Z	Kol-APe	34	Starbucks	Kolumbie	K	KolK-Star
16	APe	Indie	Z	IndI-APe	35	Nescafé DG	Kolumbie	K	KolK-Nesc
17	APe	Indie	Z	IndII-APe	36	L'OR	Kolumbie	K	KolK-L'Or
18	Coffeespot	Etiopie	Z	Eti-Spot	37	L'OR	Indie	K	IndK-L'Or
19	Coffeespot	Brazílie	Z	Bra-Spot					

4.1.1 Příprava vzorků k analýze

Vzorky zrnkové kávy bylo před samotným stanovením třeba vysušit, navážit, namlít a natabletovat. Vzorky káv z kapslí bylo třeba navážit a natabletovat.

Sušení

Káva má po zpracování suchou i mokrou cestou 11–12 % vlhkosti (Wellman 1961; Wintgens 2004). Na prvních pěti vzorcích kávy bylo provedeno zkušební sušení kávy. Vzorky káv 1–5 o navážce asi 100 g byly umístěny do sušárny HS 61 A, kde byly při 50 °C 5 hodin. Po vystydnutí v exsikátoru se silikagelovou náplní byly kávy zváženy. Všechny vzorky byly po sušení o 0,12–0,30 g těžší. Tento rozdíl je pravděpodobně způsoben průmyslovým sušením ve vakuu. Dle rozdílů hmotností před sušením a po sušení uvedených v tabulce 10 bylo rozhodnuto, že vzorky káv nebudou před dalším zpracováním přesušovány.

Tabulka 10 Hmotnost vzorků káv před vysušením a po vysušení

Vzorek č.	Hmotnost před sušením (g)	Hmotnost po sušení (g)	Rozdíl hmotností (g)
1	100,05	100,23	0,18
2	100,05	100,17	0,12
3	100,06	100,36	0,30
4	100,09	100,27	0,18
5	100,04	100,18	0,14

Vážení

Všechny vzorky zrnkových káv (vzorky č. 1–29) byly na předvážkách METTLER MT5 naváženy do polyethylenových sáčků se zipem. Navážka každého vzorku měla asi 100 g.

Během vážení bylo testováno, zda mají všechny vzorky zrnkových káv (vzorky č. 1–29) deklarovanou hmotnost obsahu balení. Kávy od pražírén APe a Coffeedream byly ve 100g balení, od pražírén Longberry, Coffeespot a Starbucks v balení o hmotnosti 250 g a kávy L'OR a Tchibo byly v 500g balení. Všechny kávy splnily deklarovanou hmotnost. Příkladem káva India blend (vzorek č. 16) z pražírny APe měla o 0,11 g více než bylo deklarováno. Druhým extrémním případem káva Tchibo Brazil (vzorek č. 11), která měla hmotnost 506,89 g, což je o 6,89 g více než bylo deklarováno na obalu.

Deklarované hmotnosti kapslí kávy se různí, konkrétní hmotnost jedné kapsle Nespresso a kapsle Starbucks je 5,7 g, kapsle Nescafé Dolce Gusto 5,0 g, kapsle Tchibo Cafissimo 8,0 g a kapsle L'OR 5,2 g. Všechny kapsle byly zváženy a všechny měly minimálně deklarovanou hmotnost.

Mletí

Vzorky kávy 1–29 byly postupně namlety v mlýnku Bosh MKM6003 za vzniku jemné homogenní směsi kávy. Vzorky káv 30–37 nebylo třeba mlít, protože již byly ve formě homogenní směsi.

Tabletování

Na předvážkách METTLER MT5 bylo naváženo cca 1,3 g každého vzorku. Navážky byly převedeny do tabletovačky a lisováním v motorizovaném laboratorním lisu MP250M za tlaku $600 \text{ kg}\cdot\text{cm}^{-2}$ byly vytvořeny tablety o průměru 27 mm. Vzniklé tablety byly zvaženy na přesných vahách METTLER AT261 a byly zataveny do polyethylenových pouzder, která měla průměr 35 mm a byla praná v HNO_3 . Na zatavení tablet byl použit lihový kahan a pinzeta.

Pro kontrolu kvality analytických výsledků byl použit referenční materiál CRPG (Centre de Recherches Pétrographiques en Géochimiques) RM Granite GS-N. Stejným způsobem jako vzorky byly připraveny tablety z tohoto referenčního materiálu, navážením cca 0,5 g a smísením se škrobem laboratorní čistoty cca 1 g.

4.1.2 Aktivace vzorků káv

Tablety vzorků káv, standardní referenční materiál a standardy vybraných prvků zatavené v polyethylenových pouzdrech byly společně s měděnými monitory ($^{65}\text{Cu}(\gamma,n)^{64}\text{Cu}$, $T_{1/2}=12,8 \text{ h}$) umístěny do válcovitého polystyrenového pouzdra, které bylo ozářeno.

Krátkodobá aktivace

Do pouzdra bylo vždy umístěno 4–5 kusů vzorků, tableta se standardním referenčním materiálem, jedna tableta s multielementními standardy studovaných prvků, blank a měděné monitory. Připravená polystyrenová pouzdra byla postupně umístěna do vakuové ozařovací komory mikrotronu MT-25 a po dobu 10 minut ozařována v ose svazku energií 19,5 MeV a proudem $10 \mu\text{A}$. Po ukončení ozařování bylo po 15 minutách zahájeno měření na detektoru CAN 30. Prodleva mezi měřeními byla z důvodu vymření linky 511 keV interferujících radionuklidů ^{15}O a ^{13}N , které by zvyšovaly pozadí měření.

Dlouhodobá aktivace

Pro dlouhodobou aktivaci na mikrotronu MT-25 bylo použito ozařování vzorků v rotujícím karuselu, které umožňuje ozářit všechny vzorky stejnou dávkou fotonového záření. I zde byly umístěny dva měděné monitory pro kontrolu fotonové dávky, která byla 100%. Ve vakuové ozařovací komoře mikrotronu MT-25 byl karusel se vzorky ozařován v ose svazku energií 21 MeV a proudem $10 \mu\text{A}$ po dobu 7 hodin.

4.1.3 Detekce záření gama

Aktivita radionuklidů, která byla produkována fotojadernými reakcemi při IPAA, byla měřena spektrometrií záření gama s použitím tří polovodičových HPGe (High Purity Germanium) detektorů propojených řetězcem lineární elektroniky s gama-spektrometrickým systémem Canberra GENIE 2000.

Při krátkodobé aktivaci byl pro měření aktivity radionuklidů použit detektor Canberra 30 (koaxiální) relativní účinnost 30 %, s rozlišením FWHM: 1.75–1.85 keV, pro fotony ^{60}Co o energii 1332,5 keV který je v mikrotronové laboratoři v Karlíně v Praze. Vzorek byl vždy umístěn v poloze 1 cm od čela detektoru. Měření vzorků káv a standardů probíhalo 5 minut, měděné monitory byly měřeny po dobu 3 minut.

Při dlouhodobé aktivaci bylo měření prováděno na detektoru ORTEC 53 (koaxiální) relativní účinnost 53 %, rozlišení FWHM 1,75 keV pro fotony ^{60}Co o energii 1332,5 keV a na detektoru Canberra 78 (koaxiální) s relativní účinností 78 %, rozlišení FWHM 1,87 keV pro fotony ^{60}Co o energii 1332,5 keV, oba umístěné v Řeži u Prahy. Měření bylo provedeno celkem třikrát - v den ozáření, kdy probíhalo měření každého vzorku 20 minut; den po ozáření, kdy měření každého vzorku trvalo 40 minut; a 10. den po ozáření, kdy detekce jednoho vzorku trvala 2 hodiny.

Vyhodnocení aktivity bylo provedeno relativní metodou, mírou aktivity byl počet pulzů v příslušném píku záření γ . Vyhodnocení energie a ploch píků ve spektrech bylo provedeno programem Genie 2000 (Canberra, USA).

V tabulce 11 je dle Řandy & Kreisinger (1983) zpracován přehled fotojaderných reakcí vedoucích ke vzniku radionuklidů, na základě kterých byly prvky stanovovány i s příslušnými energiemi reakcí a poločasy rozpadu prvků.

Tabulka 11 Stanovované prvky, příslušné radionuklidy a fotojaderné reakce vedoucí k jejich vzniku
m – minuta, h – hodina, d - den, r - rok

Prvek	Radionuklid	Poločas rozpadu	Hlavní E_γ (KeV)	Jaderná reakce	Prahová E_γ (MeV)
Na	^{22}Na	2,6 r	1274,5	$^{23}\text{Na}(\gamma, n)^{22}\text{Na}$	12,42
Mg	^{24}Na	15,0 h	1368,6	$^{25}\text{Mg}(\gamma, p)^{24}\text{Na}$	12,06
Si	^{29}Al	6,6 m	1273,0	$^{30}\text{Si}(\gamma, p)^{29}\text{Al}$	13,51
Cl	$^{34\text{m}}\text{Cl}$	32,0 m	145,7	$^{35}\text{Cl}(\gamma, n)^{34\text{m}}\text{Cl}$	12,78
K	^{38}K	7,6 m	2166,8	$^{39}\text{K}(\gamma, n)^{38}\text{K}$	13,07
Ca	^{43}K	22,3 h	372,0	$^{44}\text{Ca}(\gamma, p)^{43}\text{K}$	12,16
Ca	^{43}K	22,3 h	616,0	$^{44}\text{Ca}(\gamma, p)^{43}\text{K}$	12,16
Ti	^{47}Sc	3,4 d	159,4	$^{48}\text{Ti}(\gamma, p)^{47}\text{Sc}$	11,44
Cr	^{51}Cr	2,7 d	320,1	$^{52}\text{Cr}(\gamma, n)^{51}\text{Cr}$	12,03
Mn	^{54}Mn	312,2 d	834,8	$^{55}\text{Mn}(\gamma, n)^{54}\text{Mn}$	10,22
Fe	^{56}Mn	2,6 h	846,6	$^{57}\text{Fe}(\gamma, p)^{56}\text{Mn}$	10,56
Co	^{58}Co	71,3 d	810,6	$^{59}\text{Co}(\gamma, n)^{58}\text{Co}$	10,46
Ni	^{57}Ni	36 h	1377,6	$^{58}\text{Ni}(\gamma, n)^{57}\text{Ni}$	12,20
Zn	^{63}Zn	38,4 m	669,6	$^{64}\text{Zn}(\gamma, n)^{63}\text{Zn}$	11,85
Br	^{80}Br	17,6 m	617,0	$^{81}\text{Br}(\gamma, n)^{80}\text{Br}$	10,16
Rb	^{84}Rb	32,9 d	881,5	$^{85}\text{Rb}(\gamma, n)^{84}\text{Rb}$	10,48
Sr	$^{87\text{m}}\text{Sr}$	2,8 h	388,4	$^{88}\text{Sr}(\gamma, n)^{87\text{m}}\text{Sr}$	11,48
Y	^{88}Y	106,6 d	1836,1	$^{89}\text{Y}(\gamma, n)^{88}\text{Y}$	11,45
Zr	^{89}Zr	78,4 h	909,1	$^{90}\text{Zr}(\gamma, n)^{89}\text{Zr}$	11,99
Nb	$^{92\text{m}}\text{Nb}$	10,2 d	934,5	$^{93}\text{Nb}(\gamma, n)^{92\text{m}}\text{Nb}$	8,96
Cs	^{132}Cs	6,5 d	667,6	$^{133}\text{Cs}(\gamma, n)^{132}\text{Cs}$	9,06
Ba	$^{135\text{m}}\text{Ba}$	28,7 h	268,1	$^{136}\text{Ba}(\gamma, n)^{135\text{m}}\text{Ba}$	9,47
Pb	^{203}Pb	52,1 h	279,2	$^{204}\text{Pb}(\gamma, n)^{203}\text{Pb}$	8,24
Ce	^{139}Ce	137,2 d	165,9	$^{140}\text{Ce}(\gamma, n)^{139}\text{Ce}$	9,24
Nd	^{147}Nd	11,1 d	91,1	$^{148}\text{Nd}(\gamma, n)^{147}\text{Nd}$	7,33

5 Výsledky

Ve vybraných vzorcích káv bylo sledováno celkem 23 prvků pomocí instrumentální fotonové aktivační analýzy. Stanovované prvky byly ve standardech měřených společně s analyzovanými vzorky. Ve vzorcích byla stanovena koncentrace 8 prvků a 15 prvků bylo v analyzovaných vzorcích pod mezí detekce.

Pro prvky, jejichž koncentrace ve vzorcích byla pod detekčním limitem, jsou v tabulce 12 uvedeny jejich detekční limity.

Tabulka 12 Detekční limity prvků v mg.kg⁻¹ vyhodnocené programem Genie 2000

Prvek	Mez detekce	Prvek	Mez detekce
Ba	29,52	Nd	20,32
Br	14,58	Pb	6,255
Ce	2,665	Si	6009
Co	4,603	Sr	9,029
Cr	27,44	Y	3,070
Cs	0,287	Zn	963,2
Na	399,2	Zr	0,826
Nb	1,473		

Výsledná koncentrace stanovených prvků v této práci je vždy udávána s rozšířenou kombinovanou nejistotou U ($k=2$), což je nejistota daná statistikou měření aktivity a nejistotou z dalších zdrojů, jakými jsou například vážení a fluktuace ozařovací a měřicí geometrie, odhadnutou úhrnem na 2 %. Pro ověření správnosti stanoveného obsahu prvků byl společně se vzorky stanoven referenční materiál Granite G-SN, jež má certifikované hodnoty uváděné s nejistotou vyjádřenou směrodatnou odchylkou σ , která má 95 % spolehlivost (viz tabulka 13).

Tabulka 13 Srovnání certifikovaných hodnot (mg.kg⁻¹ $\pm \sigma$) a stanovených koncentrací prvků (mg.kg⁻¹ $\pm U$) v referenčním materiálu Granite G-SN

Prvek	Certifikovaná hodnota	Stanovená koncentrace
Ca	17587,5 \pm 357,2 (2,5 \pm 0,05 % CaO)*	17643,0 \pm 1506,6 (2,47 \pm 0,21 % CaO)
Cl	450,0***	396,3 \pm 82,9**
K	37590 \pm 497 (4,63 \pm 0,06 % K ₂ O)*	32362 \pm 4826 (3,90 \pm 0,58 % K ₂ O)
Fe	26227,5 \pm 279,8 (3,75 \pm 0,04 % Fe ₂ O ₃ T)*	24933,0 \pm 1915,7 (3,56 \pm 0,25 % Fe ₂ O ₃ T)
Mg	13689,0 \pm 301,5 (2,3 \pm 0,05 % MgO)*	14123,0 \pm 736,7 (2,5 \pm 0,12 % MgO)
Mn	433,8 \pm 31,0 (0,056 \pm 0,004 % MnO)*	482,05 \pm 64,27 (0,075 \pm 0,010 % MnO)
Ru	185,0 \pm 5,0	186,3 \pm 7,2**
Ti	4075,2 \pm 179,8	4055,6 \pm 227,1

*v certifikátu ve formě oxidu, **koncentrace stanoveného prvku uvedena $\pm \sigma$, ***necertifikovaná hodnota

Do ozařovaného pouzdra se vzorky byly během krátkodobé aktivace umístěny tři měřené monitory pro přepočítání intenzity záření, jak již bylo uvedeno v kapitole 4.1.2 *Aktivace vzorků káv*. Výsledné intenzity záření, kterými byly vzorky ozářeny, byly následně použity pro výpočet koncentrací prvků ve vzorcích (Q – míra dávky fotonového záření dle rovnice 3). Tabulka 14 je příklad tabulky s přepočtem intenzity dopadající na vzorky konkrétně z aktivace ST IPAA provedené 5. října 2020.

Tabulka 14 Výpočet intenzity záření dopadajícího na vzorky při ST IPAA

Intenzita Z = naměřená intenzita dopadající na měřené monitory, Intenzita P = přepočtená intenzita dopadající na vzorky

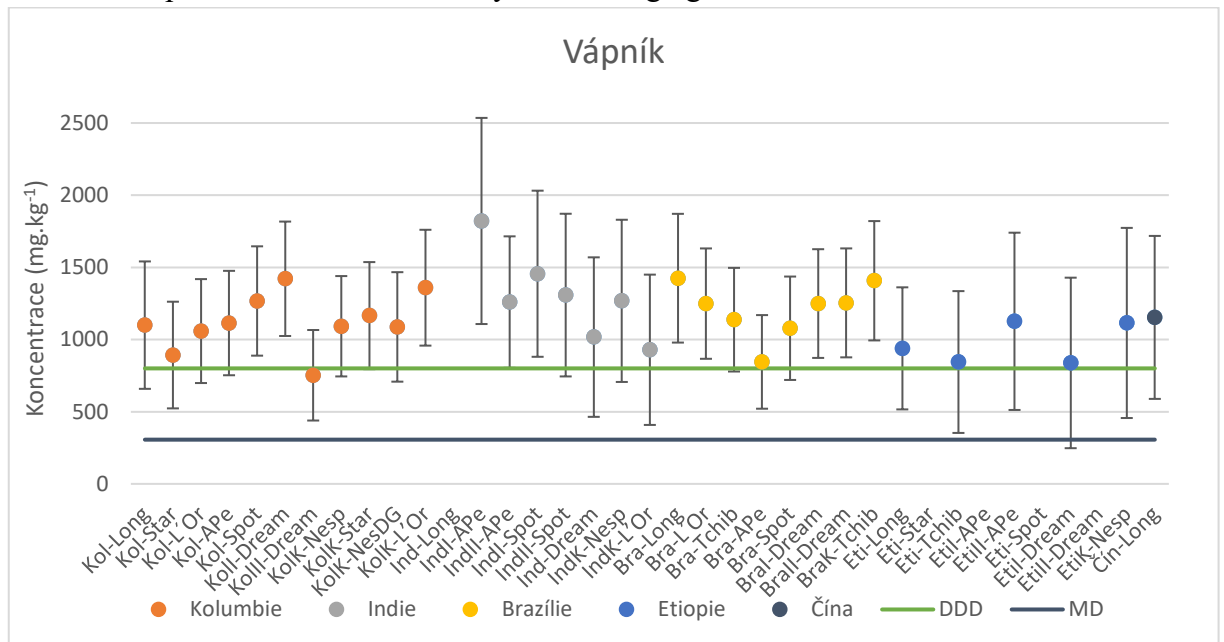
Poloha	Vzorek	Intenzita Z	Intenzita P	Faktor
1	Cu43	98,85	98,85	0,989
2	MESG7-2		90,78	0,918
3	IndII-Spot		82,71	0,837
4	Ind-Dream		74,64	0,755
5	Cu44	66,57	66,57	0,673
6	GSN-2		61,40	0,621
7	IndK-L'Or		56,23	0,569
8	Eti-Long		51,07	0,517
9	Cu42	40,73	40,73	0,412

Koncentrace prvků s rozšířenou kombinovanou nejistotou stanovenou v analyzovaných kávu je uvedena v Příloze 1. Koncentrace byla stanovena u vápníku, chloru, draslíku, železa, hořčíku, manganu, rubidia a titanu. Nejzastoupenějším stanoveným prvkem byl draslík, jehož průměrná koncentrace v analyzovaných kávu byla $17449,39 \pm 2320,94 \text{ mg.kg}^{-1}$. Naopak ze stanovených prvků mělo nejnižší koncentraci rubidium, které bylo v kávu průměrně v koncentraci $23,15 \pm 4,63 \text{ mg.kg}^{-1}$.

Pro každý ze stanovených prvků byl sestaven graf s chybovými úsečkami udávajícími rozšířenou kombinovanou nejistotu (viz graf 1–8). U prvků, kde nebyla stanovena koncentrace ve všech analyzovaných vzorcích jsou do grafu přidány hodnoty meze detekce (MD). Pro biogenní prvky byla v grafu znázorněna hodnota doporučené denní dávky prvku (DDD).

Vápník

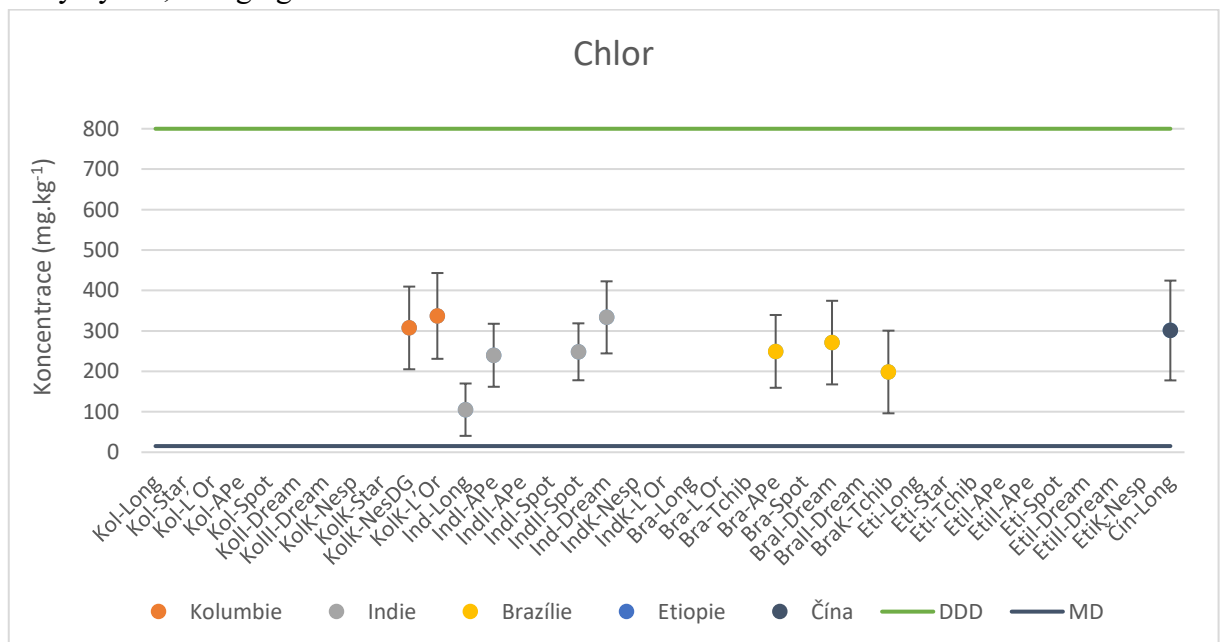
Vápník byl stanoven ve 32 analyzovaných vzorcích kávy. Stanovené koncentrace se pohybovaly v rozmezí 725,49–1821,40 mg.kg⁻¹. Vzorky číslo 2, 6, 12, 18 a 24 měly koncentraci pod mezí detekce, která byla 306,4 mg.kg⁻¹.



Graf 1 Stanovená koncentrace vápníku (mg.kg⁻¹) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

Chlor

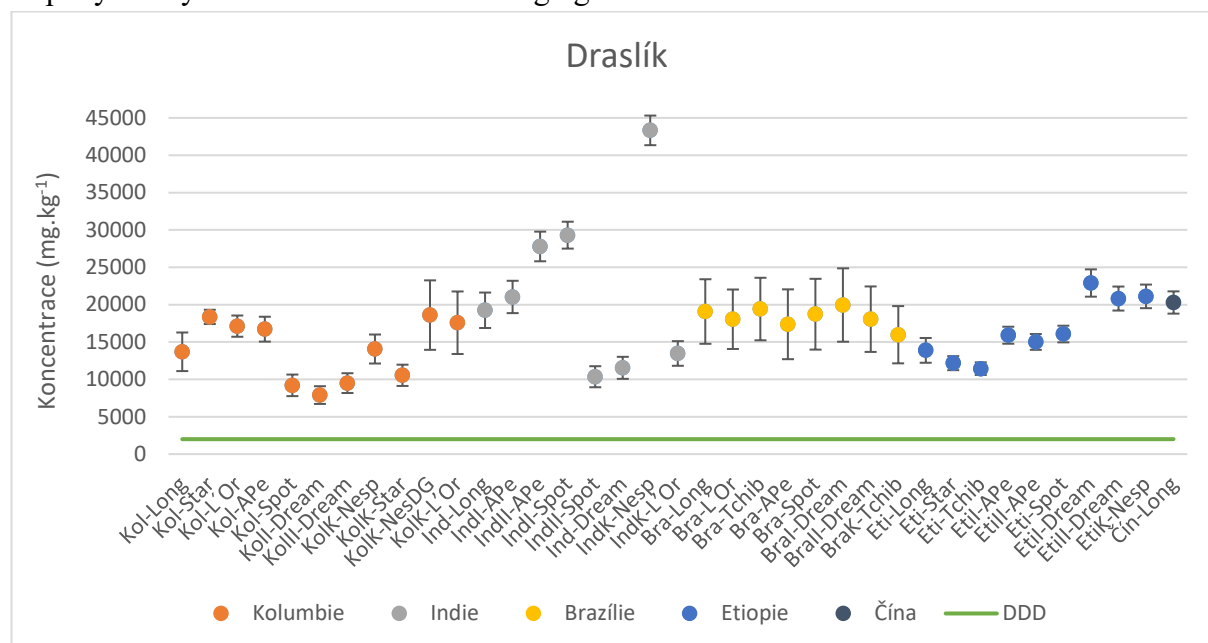
Chlor byl stanoven v 10 analyzovaných vzorcích kávy. Stanovené koncentrace se pohybovaly v rozmezí 105,24–337,12 mg.kg⁻¹. Zbylé vzorky měly koncentraci nižší než detekční limit, který byl 15,24 mg.kg⁻¹.



Graf 2 Stanovená koncentrace chloru (mg.kg⁻¹) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

Draslík

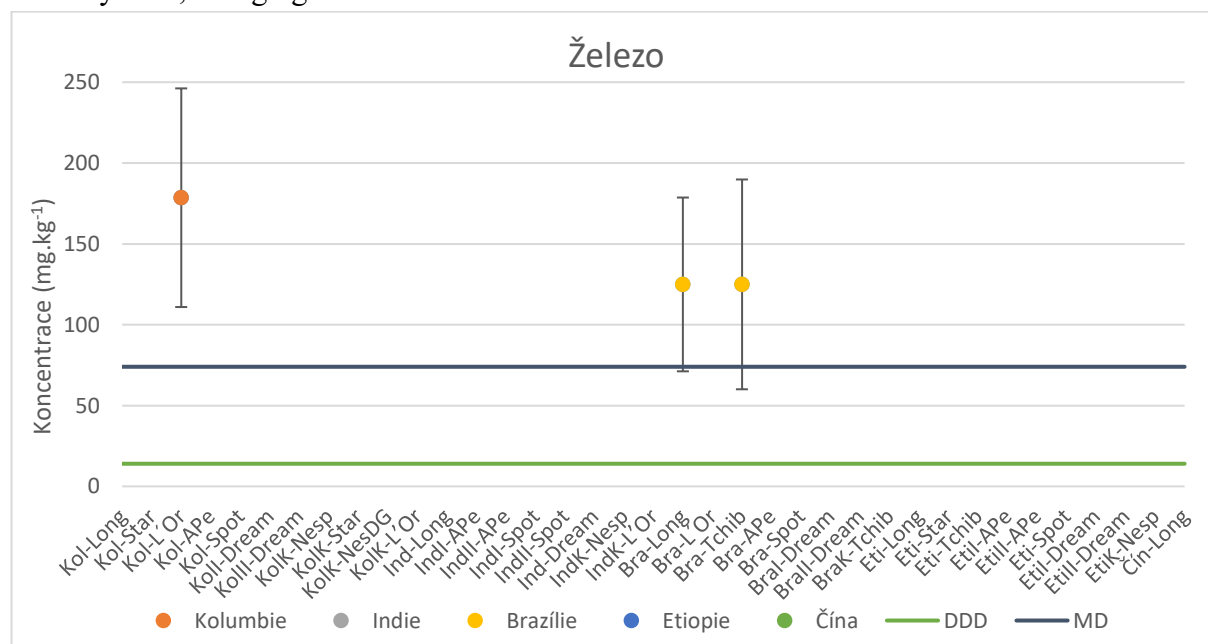
Draslík byl stanoven ve všech analyzovaných vzorcích kávy. Stanovené koncentrace se pohybovaly v rozmezí 7900–43327 mg.kg⁻¹.



Graf 3 Stanovená koncentrace draslíku (mg.kg⁻¹) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

Železo

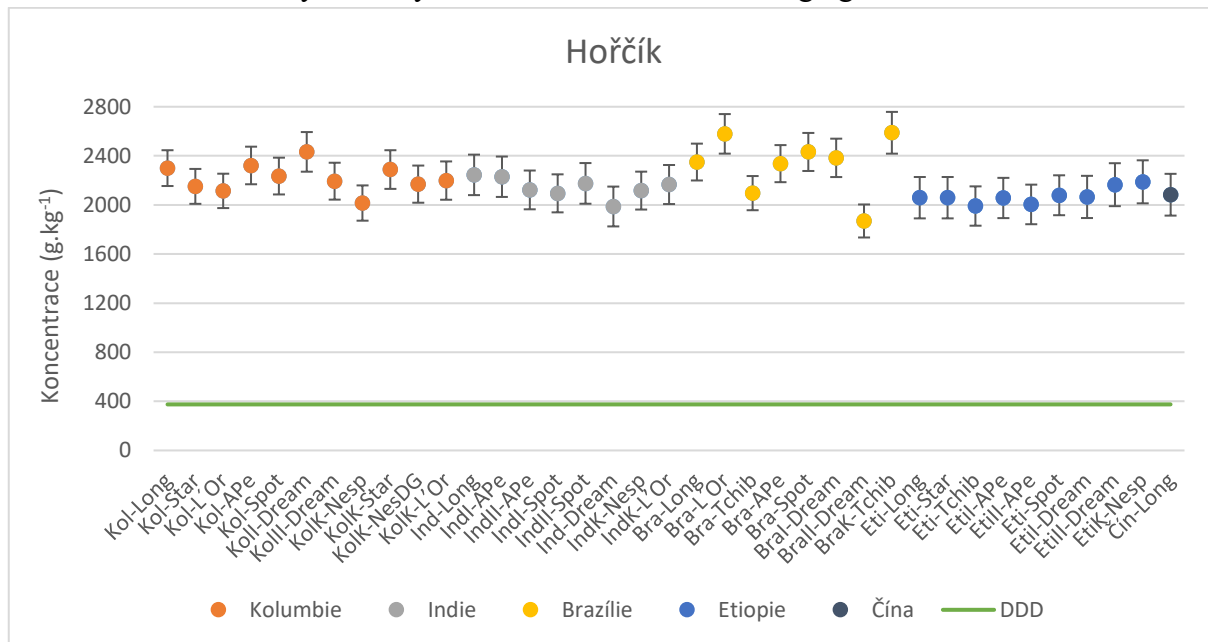
Železo bylo stanoven ve 3 analyzovaných vzorcích kávy. Stanovené koncentrace byly 124,92; 124,95 a 178,55 mg.kg⁻¹. Celkem 34 analyzovaných vzorků mělo koncentraci pod mezí detekce, která byla 73,99 mg.kg⁻¹.



Graf 4 Stanovená koncentrace železa (mg.kg⁻¹) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

Hořčík

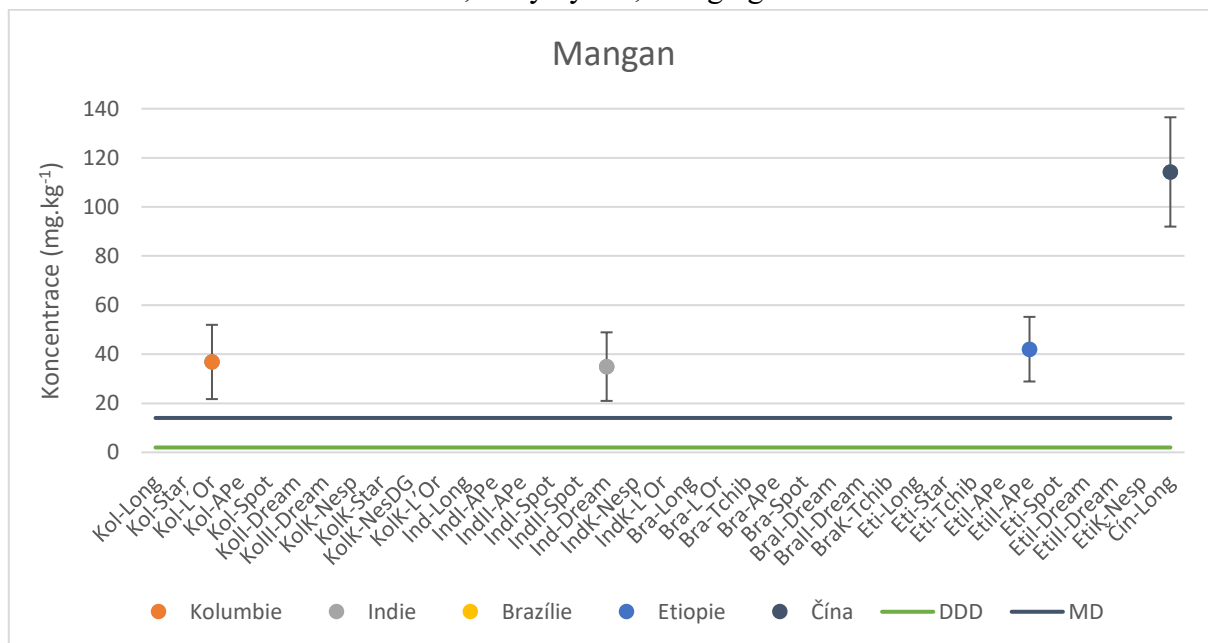
Hořčík byl stanoven ve všech 37 analyzovaných vzorcích kávy. Stanovené koncentrace dosahovaly hodnoty v rozmezí 1869,4–2588,0 mg.kg⁻¹.



Graf 5 Stanovená koncentrace hořčíku (mg.kg⁻¹) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

Mangan

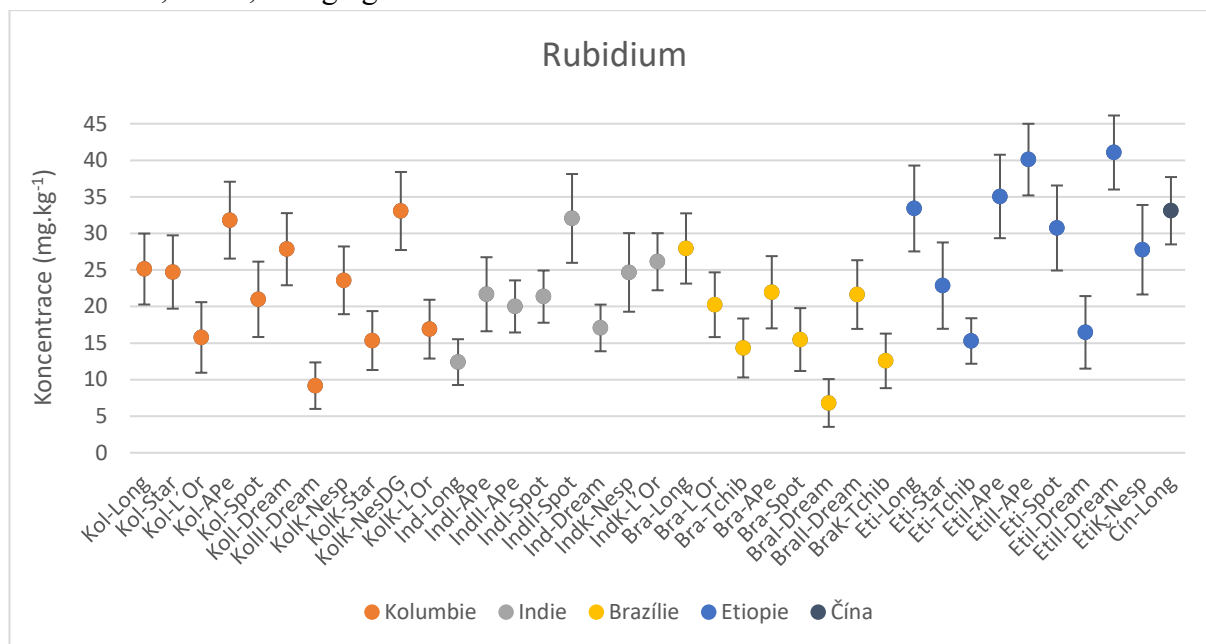
Mangan byl stanoven ve 4 analyzovaných vzorcích kávy, a to ve vzorku číslo 5, 8, 13 a 29. Stanovené koncentrace se pohybovaly v rozmezí 34,94–114,24 mg.kg⁻¹. Zbylé vzorky měly koncentraci nižší než detekční limit, který byl 14,03 mg.kg⁻¹.



Graf 6 Stanovená koncentrace manganu (mg.kg⁻¹) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

Rubidium

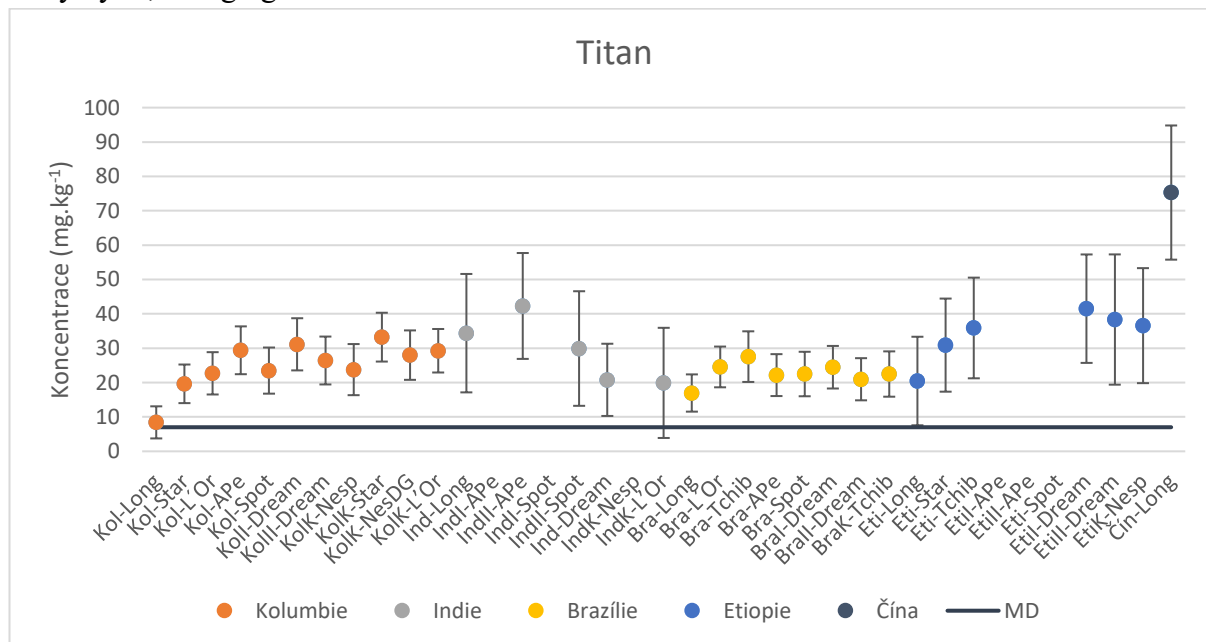
Rubidium bylo stanoveno ve všech analyzovaných vzorcích kávy. Stanovené koncentrace byly v rozmezí 6,81–41,06 mg.kg⁻¹.



Graf 7 Stanovená koncentrace rubidia (mg.kg⁻¹) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

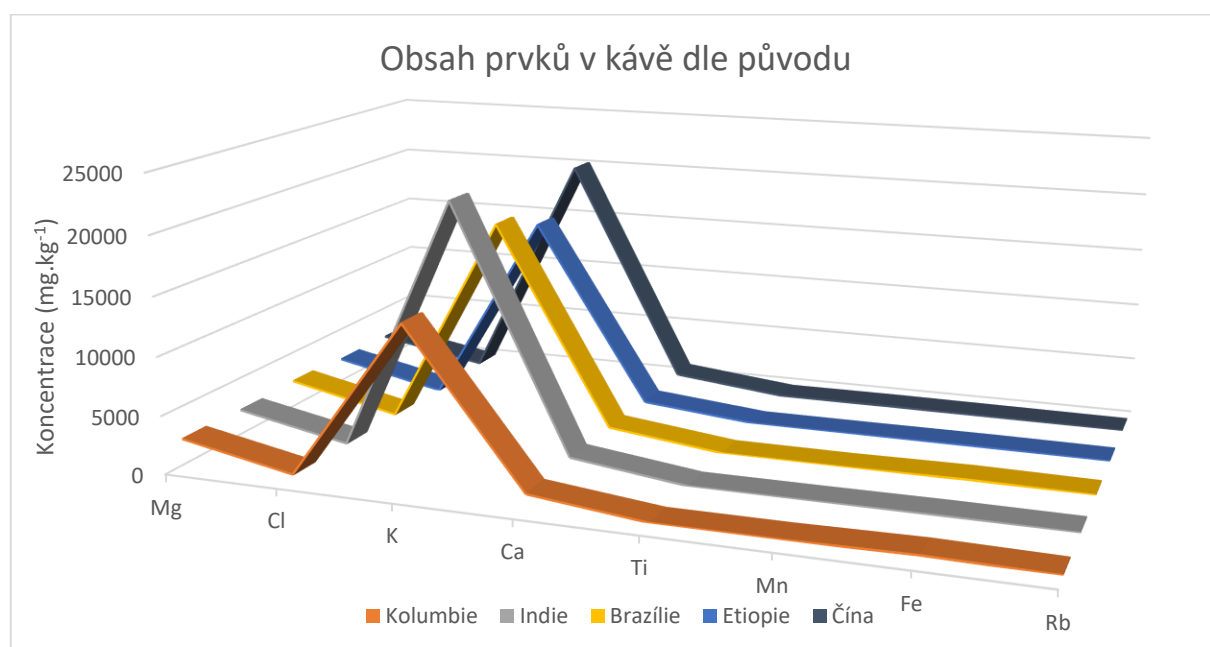
Titan

Titan byl stanoven v 31 analyzovaných vzorcích kávy. Stanovené koncentrace se pohybovaly v rozmezí 8,42–75,29 mg.kg⁻¹. Celkem 6 vzorků mělo koncentraci nižší než detekční limit, který byl 7,01 mg.kg⁻¹.

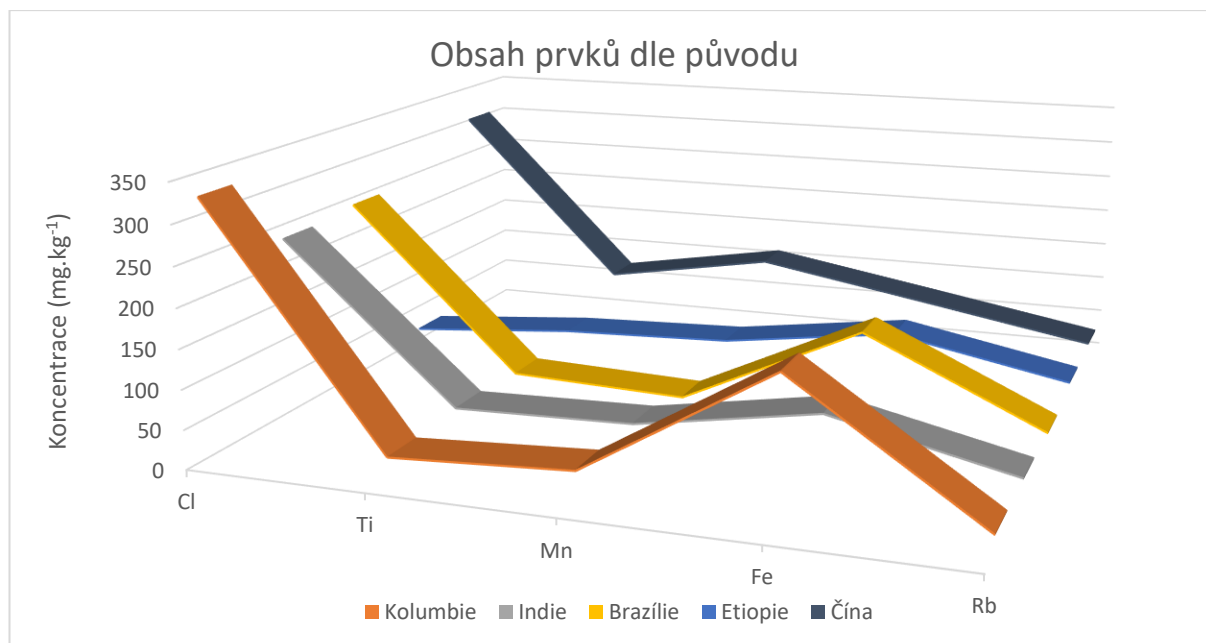


Graf 8 Stanovená koncentrace titanu (mg.kg⁻¹) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

Dále byl sestrojen Graf 9 z průměrných hodnot stanovených koncentrací sledovaných prvků seskupených dle země původu vzorku kávy. Z grafu je patrné, že nejzastoupenějším prvkem byl draslík, který má nejvyšší průměrnou koncentraci ve vzorcích z Indie. Zbylé prvky byly v analyzovaných kávách v nižších koncentracích a jejich zobrazení v grafu 9 je kvůli vysoce zastoupenému draslíku méně patrné. Patrný je ovšem podobný průběh křivek všech pěstebních oblastí. Pro lepší zobrazení méně zastoupených prvků byl sestrojen graf 10, který zobrazuje průměrné hodnoty stanovených koncentrací prvků vyjma draslíku, hořčíku a vápníku seskupených dle pěstebních oblastí. Hořčík byl druhým nejzastoupenějším prvkem, který byl průměrně nejvíce zastoupený v kávách z Brazílie. Třetím nejzastoupenějším prvkem v analyzovaných kávách byl vápník, který měl nejvyšší průměrný obsah ve vzorcích z Indie. Vápník byl následován chlorem, železem, manganem, titanem a nejnižší průměrnou koncentrací ze stanovených prvků mělo rubidium. Z grafu 10 jsou patrné rozdíly obsahů méně zastoupených prvků dle pěstebních oblastí.



Graf 9 Stanovené průměrné koncentrace stanovených prvků (mg.kg^{-1}) seskupené dle původu



Graf 10 Stanovené průměrné koncentrace (mg.kg⁻¹) chloru, titanu, manganu, železa a rubidia seskupené dle původu

Pomocí programu Statistica CZ 12 byly naměřené hodnoty statisticky zpracovány. Byla sledována závislost mezi obsahem prvků a původem vzorků. Vzorek č. 5, tedy káva z Číny, byl z vyhodnocení vynechán, jelikož byl jediný ze jmenované oblasti a pro statistické vyhodnocení byl nevhodný. Pro prvky, u nichž byl stanoven dostatek hodnot koncentrací ve vzorcích, tedy prvky vápník, draslík, hořčík, rubidium a titan, byly zpracovány krabicové grafy (box ploty) (viz příloha 2–6), které názorně zobrazují závislost koncentrace vybraného prvku na zemi původu. Krabicové grafy odhalily extrémní a odlehlé hodnoty, které byly potvrzeny Grubbsovým testem odlehlých hodnot a následně byly ze statistické analýzy vyřazeny. Již z krabicových grafů byl patrný rozdíl mezi některými oblastmi, který byl vyhodnocen pomocí analýzy rozptylu. Analýza rozptylu (ANOVA) byla prováděna na hladině významnosti p s 95% pravděpodobností. Výsledky analýzy rozptylu jsou uvedeny v příloze 7–11. V případě, kdy byla hodnota p menší než 0,05, bylo vyhodnoceno, že existuje statisticky významný rozdíl mezi pěstebními oblastmi, a byl použit Scheffeho test odhalující mezi kterými konkrétními oblastmi byl statisticky významný rozdíl.

Statisticky významný rozdíl mezi obsahem prvku a pěstební oblastí kávy stanovený pomocí analýzy rozptylu na hladině významnosti p s 95% pravděpodobností byl odhalen u hořčíku, rubidia a titanu. Z tabulky 15 je patrné, že existuje statisticky významný rozdíl v obsahu hořčíku mezi Etiopií a Brazílií. Mezi Etiopií a Brazílií byl také prokázán statisticky významný rozdíl v obsahu rubidia a titanu (viz tabulka 16 a 17). U hořčíku, rubidia i titanu to byly jediné statisticky významné rozdíly mezi pěstebními oblastmi.

Tabulka 15 Scheffeho test pro hořčík (Statistica CZ 12)

Scheffeho test; proměnná Mg (Tabulka1.sta) Pravděpodobnosti pro post-hoc testy Chyba: meziskup. PČ = 20885,, sv = 28,000					
Č. buňky	Původ	{1}	{2}	{3}	{4}
		2220,0	2142,2	2329,2	2063,8
1	Kolumbie		0,721082	0,462365	0,281550
2	Indie	0,721082		0,106377	0,823487
3	Brazílie	0,462365	0,106377		0,029519
4	Etiopie	0,281550	0,823487	0,029519	

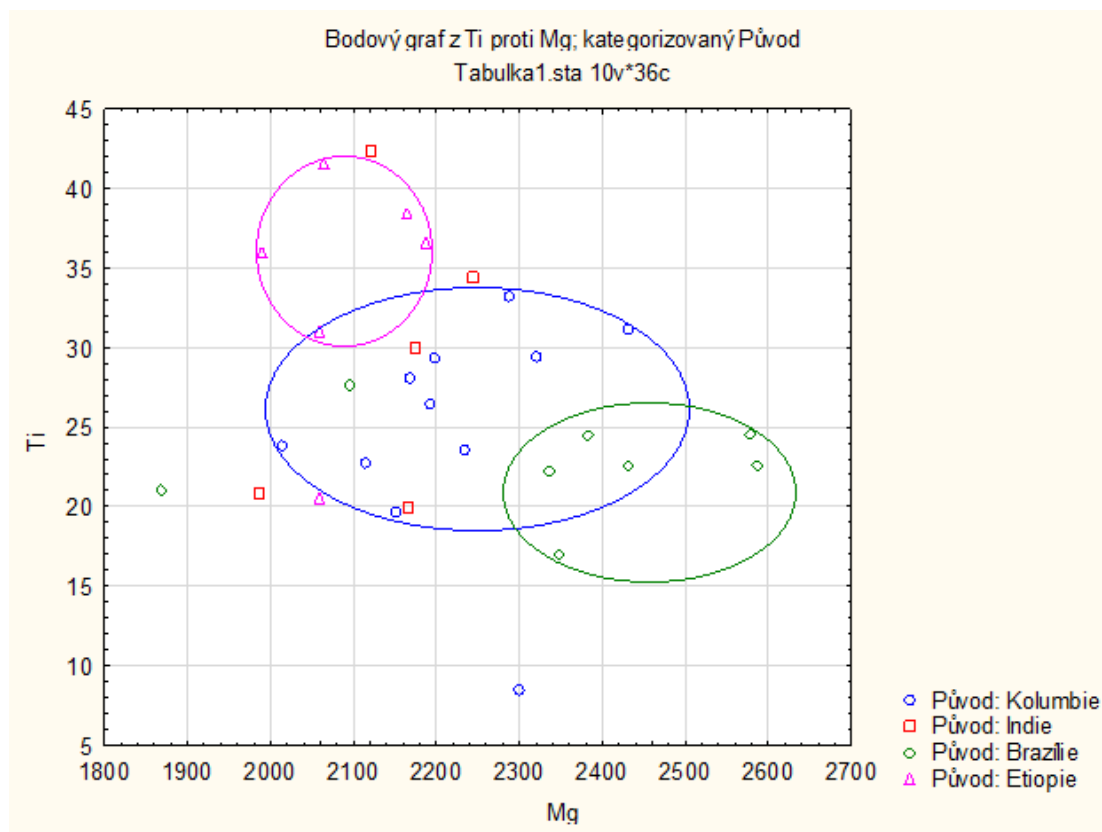
Tabulka 16 Scheffeho test pro rubidium (Statistica CZ 12)

Scheffeho test; proměnná Rb (Tabulka1.sta) Pravděpodobnosti pro post-hoc testy Chyba: meziskup. PČ = 56,560, sv = 32,000					
Č. buňky	Původ	{1}	{2}	{3}	{4}
		22,211	21,918	17,619	29,191
1	Kolumbie		0,999840	0,635347	0,254586
2	Indie	0,999840		0,729017	0,284848
3	Brazílie	0,635347	0,729017		0,031294
4	Etiopie	0,254586	0,284848	0,031294	

Tabulka 17 Scheffeho test pro titan (Statistica CZ 12)

Scheffeho test; proměnná Ti (Tabulka1.sta) Pravděpodobnosti pro post-hoc testy Chyba: meziskup. PČ = 34,379, sv = 24,000					
Č. buňky	Původ	{1}	{2}	{3}	{4}
		26,701	29,457	23,528	33,943
1	Kolumbie		0,863774	0,752772	0,155484
2	Indie	0,863774		0,412402	0,664621
3	Brazílie	0,752772	0,412402		0,034102
4	Etiopie	0,155484	0,664621	0,034102	

Po statistickém vyhodnocení bylo sledováno, zda je možné na základě obsahu dvou prvků určit původ kávy. Byl sestaven bodový graf korelace obsahu titanu a hořčíku (viz graf 11), které sejevily jako nejvhodnější z námi stanovených prvků. Avšak na základě této korelace by nebylo možné neznámý vzorek jednoznačně zařadit do pěstební oblasti, jelikož se svými obsahy země původu kávy překrývají.



Graf 11 Korelace obsahu titanu a obsahu hořčíku v analyzovaných kávách

Dále byla sledována závislost obsahu prvků na typu kávy, tedy byly sledovány rozdíly obsahu prvků mezi zrnkovou kávou a kávou z kapslí. I přes to, že celkový průměrný obsah prvků byl vyšší v kapslových kávách (viz tabulka 18), prvky mangan ani železo nebyly v kapslových kávách stanoveny. Vyšší průměrný obsah v kapslových kávách byl stanoven u draslíku, chloru, hořčíku a vápníku. V zrnkové kávě byl stanoven vyšší průměrný obsah u titanu, rubidia, manganu a železa. Pomocí statistického programu Statistica CZ 12 byl proveden dvouvýběrový t-test (viz tabulka 19), který neodhalil mezi kapslovými a zrnkovými kávami žádný statisticky významný rozdíl s 95% pravděpodobností.

Tabulka 18 Průměrné koncentrace prvků ($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$) dle typu kávy
U vynechaných hodnot byla koncentrace pod mezí detekce

Prvek	K	Cl	Mg	Ti	Rb	Mn	Fe	Ca
Zrno	16929	249,80	2177,8	28,76	23,33	57,01	142,81	1150,2
Kapsle	19335	280,99	2216,4	27,60	22,50			1177,9

Tabulka 19 Dvouvýběrový t-test pro nezávislé vzorky kávy zrnkové a kapslové

		T-test pro nezávislé vzorky (Tabulka1)				
		Pozn.: Proměnné byly brány jako nezávislé vzorky				
Skup. 1 vs. skup. 2		Průměr skup. 1	Průměr skup. 2	Hodnota t	sv	p
Zrno vs. Kapsle		2594,857	3843,445	-0,347721	12	0,734073

Skup. 1 vs. skup. 2	Poč.plat. skup. 1	Poč.plat. skup. 2	Sm.odch. skup. 1	Sm.odch. skup. 2	F-poměr Rozptyly	p Rozptyly
Zrno vs. Kapsle	8	6	5841,759	7636,748	1,708951	0,500918

Dále byly vzorky káv rozděleny na kávy z nadnárodních korporací a na kávy z malých českých pražírén a bylo analyzováno, zda se liší v obsahu prvků. Analyzované vzorky káv značek Starbucks, L'Or, Tchibo, Nespresso a Nescafé Dolce Gusto jsou pražené a prodávané nadnárodními korporacemi. Mezi kávy z malých pražírén byly zahrnuty kávy z pražírén Longberry, APe, Coffeespot a Coffeedream. V tabulce 20 jsou uvedeny průměrné koncentrace jednotlivých prvků v kávách z nadnárodních korporací a z malých pražírén. Bylo provedeno statistické šetření pomocí programu Statistica CZ 12, které neodhalilo žádné statisticky významné rozdíly v obsahu prvků (viz Tabulka 21).

Tabulka 20 Průměrné koncentrace prvků (mg.kg⁻¹) v kávách z nadnárodních korporací (NK) a menších pražírén

Prvek	K	Cl	Mg	Ti	Rb	Mn	Fe	Ca
NK	17946	280,99	2194,5	27,00	22,81	42,03	124,95	1177,5
Pražírna	17146	249,80	2181,1	29,38	24,07	74,59	178,55	1197,9

Tabulka 21 Dvouvýběrový t-test pro nezávislé vzorky káv z nadnárodních korporací (NK) a menších pražírén

		T-test pro nezávislé vzorky (Tabulka1)				
		Pozn.: Proměnné byly brány jako nezávislé vzorky				
Skup. 1 vs. skup. 2		Průměr skup. 1	Průměr skup. 2	Hodnota t	sv	p
NK vs. Pražírna		2726,995	2635,285	0,030282	14	0,976270

Skup. 1 vs. skup. 2	Poč.plat. skup. 1	Poč.plat. skup. 2	Sm.odch. skup. 1	Sm.odch. skup. 2	F-poměr Rozptyly	p Rozptyly
NK vs. Pražírna	8	8	6197,630	5913,109	1,098549	0,904508

6 Diskuze

Káva je jednou z nejčastěji konzumovaných nápojů po celém světě. O prospěšnosti či neprospěšnosti kávy jsou stále vedeny debaty, avšak mnohé studie například Iwai et al. (2002); Galeone et al. (2010) či Butt & Sultan (2011) poukazují na její pozitivní vliv na zdraví. Káva obsahuje přes 1000 bioaktivních látek, z nichž některé mají antioxidační a protizánětlivé účinky, dále ochranné účinky před kardiovaskulárními chorobami, rakovinou tvorným bujením či vznikem Alzheimerovi či Parkinsonovy choroby (Cao et al. 2011; Poole et al. 2017). Účinky prospěšné pro zdraví organismu mají i minerální látky, které jsou v kávě přítomné (Sevcan et al. 2017).

Obsah minerálních látek i toxických prvků je ovlivněn mnoha faktory. Vliv na obsah prvků v kávě má země původu, růstové podmínky, použití hnojiv, zralost zrn při sběru, zpracování kávových zrn a podmínky pražení kávy (Singh et al. 2020). Odrůda kávy také ovlivňuje prvkové složení (Cagliani et al. 2013), proto byly pro tuto práci vybrány pouze kávy odrůdy *Coffea arabica*. Celkový obsah minerálních látek v sušině kávy se pohybuje mezi 3–5 % hmotnosti. Nejzastoupenějším prvkem je draslík, což odpovídá námi stanoveným hodnotám, a v menším množství je přítomen vápník a hořčík (Dos Santos & Oliveira 2001).

V analyzovaných vzorcích kávy jsme stanovily průměrnou koncentraci draslíku $17449,39 \pm 2320,94 \text{ mg.kg}^{-1}$, což odpovídá obsahu v pražené kávě dle Singh et al. (2020) i obsahu v mleté kávě ve studii Pohl et al. (2012). Dle statistického vyhodnocení není mezi čtyřmi analyzovanými pěstebními oblastmi statisticky významný rozdíl v obsahu draslíku. Nejužší rozmezí koncentrací bylo stanoveno u vzorků z Brazílie, naopak vzorky z Indie se pohybovaly v nejširším rozmezí hodnot (viz Příloha 3). Draslík ochotně tvoří komplexy s polyfenoly a dalšími složkami kávy (Jaganyi & Madlala 2000), čímž může být stanovené množství falešně negativně ovlivněno. Doporučená denní dávka draslíku v České republice je 2000 mg (Ministerstvo zdravotnictví 2018), tudíž pro naplnění doporučené denní dávky draslíku pouze z kávy by bylo třeba zkonzumovat asi 115 g kávy denně, což odpovídá 16 šálkům kávy. Jako jeden šálek kávy bylo v této práci bráno jedno espresso připravené ze 7 g kávy. Průměrná konzumace kávy je 2–4 šálky denně (Riksen et al. 2006), pro pokrytí horní hranice průměru bylo počítáno se 4 šálky denně. Při konzumaci čtyř šálků kávy denně je káva významným přispěvatelem pro naplnění doporučené denní dávky necelými 500 mg, které pokryjí téměř čtvrtinu doporučené dávky. Draslík je biogenní prvek nezbytný pro správnou činnost nervové soustavy, činnost svalů, společně se sodíkem je zodpovědný za udržování osmotického tlaku a podílí se na metabolismu glukózy. Aburto et al. (2013) uvádí, že zvýšený příjem draslíku snížil krevní tlak u lidí s hypertenzí bez nepříznivých účinků na zdraví, a také spojuje vyšší příjem draslíku s nižším rizikem mozkové mrtvice až o 24 %.

Druhým nejzastoupenějším prvkem v námi analyzovaných vzorcích byl hořčík, jehož doporučená denní dávka je 375 mg. Průměrná koncentrace ve vzorcích byla stanovena $2187,63 \pm 157,56 \text{ mg.kg}^{-1}$, což odpovídá rozmezí dle studie Pohl et al. (2012). Pro naplnění doporučené denní dávky konzumací kávy by bylo třeba zkonzumovat asi 171 g kávy, což odpovídá 24 šálkům kávy denně. Vypitím čtyř šálků kávy denně je tedy pokrytá necelá šestina doporučené denní dávky. Stanovená koncentrace hořčíku 2220 mg.kg^{-1} v kávách z Kolumbie odpovídá obsahu hořčíku kolumbijských káv dle studie Anderson & Smith (2002). Nejnížší koncentrace hořčíku obsahovaly vzorky káv z Etiopie, naopak nejvyšší obsah byl

stanoven v kávách z Brazílie. Právě mezi vzorky z Etiopie a Brazílie byl prokázán statisticky významný rozdíl v obsahu hořčíku. Hořčík je esenciální prvek, který se účastní regulace krevního tlaku, souvisí s růstem a vývojem kostí, má příznivý vliv na onemocnění diabetes mellitus, metabolický syndrom, obezitu a jeho optimální příjem je prevencí mrtvice (Champagne 2008). Rosanoff (2013) uvádí, že průměrná pitná voda s koncentrací hořčíku 10–100 mg.kg⁻¹ může potenciálně zabránit až 4,5 milionu úmrtí na srdečné choroby a mrtvice. Celkový obsah hořčíku v jednom šálku kávy je díky obsahu hořčíku ve vodě vyšší.

Třetím nejvíce zastoupeným prvkem v analyzovaných kávách byl vápník, jehož průměrná koncentrace byla 1157,16 ± 451,32 mg.kg⁻¹. Námi stanovená koncentrace odpovídá koncentraci v pražené kávě dle studie Singh et al. (2020) a shoduje se s koncentrací v pražené mleté kávě dle studie Pohl et al. (2012). Stanovená koncentrace 974 mg.kg⁻¹ v etiopské kávě odpovídá hodnotě uvedené v tabulce 7, kde najdeme i průměrný obsah vápníku v kolumbijské kávě 1129 ± 150 mg.kg⁻¹, který se shoduje s námi stanoveným obsahem. Mezi obsahem vápníku z vybraných pěstebních oblastí kávy nebyl odhalen statisticky významný rozdíl. Doporučená denní dávka vápníku je v České republice pro dospělého člověka 800 mg. Vyšší potřeba vápníku je v době růstu, kdy je vápník důležitý pro správný vývin kostry a je dle Světové zdravotnické organizace (2009) 1300 mg. Avšak důležitou roli má dostatečný příjem vápníku nejen při stavbě kostry a prevenci osteoporózy, ale je spojován s prevencí poruchy hypertenze během těhotenství, prevencí kolorektálních karcinomů, se snížením krevního tlaku a vylepšením profilu lipoproteinových částic snížením LDL cholesterolu a zvýšením HDL cholesterolu (Cormick & Belizán 2019). Vápník je spolu s hořčíkem zodpovědný za tvrdost vody. Většinou je ve vodě ve formě vápenatých iontů v množství desítek až stovek mg.l⁻¹ (WHO 2009), což pozitivně ovlivňuje množství vápníku v jednom šálku kávy. Při průměrné konzumaci čtyř šálků kávy denně je tak pokryto víc jak 25 % doporučené denní dávky.

Dalším prvkem stanoveným ve vybraných kávách byl chlor, jehož koncentrace byla stanovena u deseti vzorků a zbylé vzorky měly koncentraci chloru pod detekčním limitem, který byl 15,24 mg.kg⁻¹. Průměrná stanovená koncentrace chloru byla 259,16 ± 92,96 mg.kg⁻¹, což je koncentrace vyšší než udává Singh et al. (2020). Námi stanovená průměrná koncentrace chloru byla počítána ze stanovených obsahů u deseti vzorků. Pokud bychom do průměru uvažovaly u nestanovených vzorků mez detekce, tak by průměrný obsah chloru byl 81,99 mg.kg⁻¹, což by odpovídalo koncentraci dle Singh et al. (2020). Jelikož koncentrace u nestanovených prvků byla pod mezí detekce, tak je skutečný průměrný obsah ještě nižší. Chlor byl pod detekčním limitem u všech vzorků z Etiopie, nejvyšší koncentrace chloru byla stanovena v kávě z Kolumbie. Doporučená denní dávka chloru je 800 mg, která konzumací námi analyzované kávy téměř není ovlivněna. Chlor se od roku 1890 používá na čištění pitné vody, čímž byl vyřešen problém kontaminace vody a přenosu nemocí jako je cholera či tyfus prostřednictvím vody. Několik novodobých studií potvrdilo, že chlorování vody přímo souvisí s rakovinou jater, střev a močového měchýře, s vysokým krevním tlakem a alergiemi (Collivignarelli et al. 2018; Mohsen et al. 2019). Chlor je těkavý plyn, jehož koncentrace při teplotě vody 30 °C klesá asi na polovinu a při teplotě varu vody 100 °C se jeho koncentrace blíží nule (Sheikhi et al. 2020). Při přípravě kávového nápoje by tedy chlor neměl z vody ani z kávy do kávového nápoje přecházet. Ovšem dle tabulky 6 je koncentrace chloru ve filtrátu kávy vyšší než v samotné zrnkové kávě. Ve studii Singh et al. (2020),

ze které je tabulka 6 převzata, není uvedena teplota vody, která byla k přípravě kávy použita. Dle Caprioli et al. (2012) je ideální teplota pro přípravu kávy 92 °C, kdy je nejefektivnější extrakce většiny bioaktivních sloučenin.

Železo bylo stanoveno pouze ve třech analyzovaných vzorcích kávy, a to v jednom vzorku z Kolumbie a ve dvou vzorcích z Brazílie. Obsah v kolumbijském vzorku byl 178,55 mg.kg⁻¹, koncentrace v kávách z Brazílie byla 124,92 a 124,95 mg.kg⁻¹. Zbylé vzorky byly pod mezí detekce, jež byla 73,99 mg.kg⁻¹. Průměrné koncentrace železa v analyzovaných pěstebních oblastech jsou dle tabulky 7 pod touto hodnotou. Železo tvoří silné komplexy s kofeinem a dalšími přítomnými alkaloidy v kávě, čímž se snižuje koncentrace volného železa (Ashu & Chandravanshi 2011). Doporučená denní dávka železa se v průběhu života mění, pro dospělého muže je dle Ministerstva zdravotnictví (2018) doporučeno 14 mg, ženy ve věku 15–50 let mají doporučenou denní dávku železa 18 mg a po menopauze klesá potřeba železa na 8 mg (Swanson 2003). Železo je důležitý biogenní prvek, který se účastní řady enzymatických reakcí nezbytných pro přežití buněk a jejich dělení. Největší množství železa je obsaženo v molekule hemoglobinu a v molekule myoglobinu, kde je nezastupitelné při vazbě, přenosu a uvolňování kyslíku vedoucí k zajištění dostatečné oxygenace tkání. Nedostatek železa způsobuje anémii, která je spojována s poruchami ovlivňujícími kognitivní vývoj. Nedostatek železa během těhotenství zvyšuje riziko sepse, perinatální úmrtnosti a nízké porodní hmotnosti novorozence (Abbaspour et al. 2014).

Mangan byl stanoven ve čtyřech analyzovaných kávách, z čehož se tři vzorky pohybovaly v rozmezí 34,94–42,03 mg.kg⁻¹ a vzorek kávy z Číny měl obsah 114,24 mg.kg⁻¹. Vzorek z Kolumbie měl koncentraci 36,84 mg.kg⁻¹, což odpovídá koncentraci stanovené v kolumbijských kávách dle Anderson & Smith (2002). Doporučená denní dávka manganu je 2 mg a pokud bychom počítaly s průměrnou koncentrací 57,01 mg.kg⁻¹, tak by pro pokrytí doporučené denní dávky bylo třeba vypít 5 káv denně. Koncentrace většiny vzorků byla ovšem pod detekčním limitem 14,03 mg.kg⁻¹, tudíž je skutečná průměrná koncentrace nižší než 18,68 mg.kg⁻¹. I s tímto obsahem je káva významným přispěvatelem manganu ve stravě a při průměrné konzumaci čtyř šálků pokrývá asi čtvrtinu doporučené denní dávky. Mangan je součástí několika metaloenzymů, podílí se například na aktivaci glykosyltransferasy, čímž ovlivňuje syntézu prothrombinu a podílí se tak na srážení krve. Dále je kofaktorem enzymů a součástí mutasy, která chrání buňky před působením volných kyslíkových radikálů způsobujících oxidační stres (Schroeder et al. 1966). Deficit manganu způsobuje poruchy ve vývoji kostry narušením mineralizace kostry a snížením produkce hyaluronové kyseliny a mukopolysacharidů, které jsou nezbytné pro vývin a růst chrupavek a spojovacích tkání. Nedostatek manganu v organismu se projevuje i v oblasti reprodukce, kde vede k testikulární degeneraci či narušení ovulačního cyklu (Zadák 2008).

Sedmým nejzastoupenějším prvkem v námi vybraných kávách byl titan. Stanovená průměrná koncentrace byla 28,49 ± 10,03 mg.kg⁻¹ a obsah v jednom šálku kávy je průměrně 0,20 mg. Nejnižší průměrná koncentrace byla v kávách z Brazílie, naopak nejvyšší průměrná koncentrace byla stanovena v kávách z Etiopie, vzorek z Číny měl nejvyšší koncentraci 75,29 mg.kg⁻¹. Titan je ve formě oxidu titaničitého často používaný bioimplantát v lékařství a je ve velkém používán jako bílý pigment v plastech, papírnictví i keramice (Wang et al. 2007). Absorpce oxidu titaničitého ze zažívacího traktu a uvolňování titanových iontů je spojováno se syndromem žlutých nehtů, který je téměř vždy provázen zánětem dýchacích cest či zánětem

vedlejších nosních dutin (Berglund & Carlmark 2011). Studie Jones et al. (2015) na základě biochemických výsledků dobrovolníků ukázala, že dávka 5 mg oxidu titaničitého na kilo tělesné hmotnosti nemá žádný negativní účinek. Negativní účinky byly ve studii Wang et al. (2007) provedené na zvířatech pozorovány až při dávkách 5 g oxidu titaničitého na kilo tělesné hmotnosti. Při konzumaci čtyř šálků káv by tedy obsah 0,8 mg titanu neměl být rizikový.

Rubidium bylo v analyzovaných kávách v průměrné koncentraci $23,15 \pm 4,63 \text{ mg.kg}^{-1}$, což odpovídá koncentraci dle Singh et al. (2020) a shoduje se s koncentrací v pražené mleté kávě dle Pohl et al (2012). V kávách z Brazílie byl stanoven nejnižší průměrný obsah rubidia. Naopak nejvyšší průměrná koncentrace byla stanovena v kávách z Etiopie. Mezi průměrnými obsahy rubidia z Brazílie a Etiopie byl stanoven statisticky významný rozdíl. Lékařská a toxikologická literatura označuje rubidium za prvek s velmi nízkým stupněm toxicity a není známa jeho letální dávka pro člověka. Zdravotní rizika rubidia jsou spojena s jeho sloučeninami, kde je rizikový aniont sloučeniny a ne rubidium samotné. Příkladem letální dávka pro 50 % myši orální cestou je u hydroxidu rubidného 900 mg.kg^{-1} (Johnson et al. 1975). Studie Meltzer et al. (1969) a studie Paschalis et al. (1978) uvádí, že jsou rubidium a chlorid rubidný vhodné pro léčbu deprese a dalších psychiatrických onemocnění. Nejnovější studie zabývající se rubidiem studují vliv rubidia na mikrobiotu. Dle Qian et al. (2021) by změna mikrobiomu prostřednictvím terapie chloridem rubidným mohla přispívat k protirakovinným a antidepresivním účinkům. Vztah rakovinných buněk a hladiny rubidia studovali Cheng et al. (2019), kteří odhalili vyšší hladinu rubidia v nádorové tkáni oproti zdravé tkáni. Rubidium obsažené v kávě by tedy mohlo přispívat k psychické pohodě.

Prvků, u kterých byla koncentrace pod mezí detekce a nebylo možné s jistotou potvrdit jejich přítomnost, bylo celkem 15. Konkrétně baryum, brom, cer, kobalt, chrom, cesium, sodík, niob, neodym, olovo, křemík, stroncium, yttrium, zinek a zirkonium. Nejvyšší mez detekce měl křemík 6009 mg.kg^{-1} a nejnižší detekční limit byl stanoven u cesia $0,287 \text{ mg.kg}^{-1}$.

Námi stanovená koncentrace barya se pohybovala na detekčním limitu $29,52 \text{ mg.kg}^{-1}$. Dle tabulky 7 byl maximální obsah barya v kávě $10,1 \text{ mg.kg}^{-1}$, tudíž maximální obsah v jednom šálku kávy je 0,07 mg. Dle SCHER (2012) je tolerovatelná denní dávka (TDI) barya $0,02 \text{ mg.kg}^{-1}$ tělesné hmotnosti. Pro 70kg dospělou osobu je TDI barya 1,4 mg a při konzumaci čtyř šálků denně je tak pokryta pětina této dávky. Barbosa et al. (2014) stanovili obsah barya v ekologicky pěstované kávě v rozmezí překrývajícím se s konvenčně pěstovanou kávou, a proto nebylo možné určit, zda byly analyzované kávy pěstované ekologicky či konvenčně.

Obsah bromu v kávě je dle tabulky 7 $0,7\text{--}8,5 \text{ mg.kg}^{-1}$, což je obsah nižší než byl náš detekční limit $14,58 \text{ mg.kg}^{-1}$. Akceptovatelný denní příjem je dle studie Van Leeuwen et al. (1987) 0,4 mg na kilo tělesné hmotnosti. Obsah bromu v jednom šálku kávy je maximálně 0,06 mg, tudíž není konzumace kávy riziková. Brom se vyskytuje v životním prostředí, kam se dostává například z textílií, elektroniky či stavebního materiálu, kde se používá jako zpomalovač hoření. Experimenty provedené in vivo a in vitro ukazují na neurotoxicitu sloučenin bromu v mozku. Koncentrace bromu v mozku je vyšší u lidí s Alzheimerovou chorobou než u zdravých lidí (Agarwal et al. 2019). Při prenatální expozici bromem mají narozené děti sníženou pozornost, koordinaci a kognitivní vývoj (Herbstman et al. 2010).

Obsah kobaltu v analyzovaných kávách byl pod detekčním limitem $4,603 \text{ mg.kg}^{-1}$, což odpovídá obsahu $0,06\text{--}1,90 \text{ mg.kg}^{-1}$ v kávě dle Pohl et al. (2012). Dle Pandey a Madhuri (2014) je maximální přípustná denní dávka $2,5 \text{ mg.den}^{-1}$, která není konzumací kávy

překročena. V jednom šálku kávy je nejvíce 0,01 mg, ve čtyřech šálcích tedy 0,04 mg. Kobalt je v organismu nezbytný, protože je součástí kyanokobalminu (vitamin B12). Mezinárodní agentura pro výzkum rakoviny (IARC) jej klasifikovala jako skupinu 2A, pro člověka pravděpodobně karcinogenní (Catalani et al. 2012).

V provedeném experimentu byla mez detekce chromu 27,44 mg.kg⁻¹. Doporučená denní dávka chromu dle Ministerstva zdravotnictví (2018) 40 µg a maximální denní dávka chromu dle Pandey a Madhuri (2014) je 250 µg. Obsah chromu v kávě je 0,02–1,29 mg.kg⁻¹ dle tabulky 7, což znamená maximální obsah chromu v jednom šálku kávy 9 µg. Konzumace čtyř šálků kávy denně tedy téměř pokrývá jeho doporučenou denní dávku, ale nepřekračuje maximální denní dávku. Chrom je stopový prvek, který je nezbytný pro metabolismus sacharidů, lipidů a bílkovin (Cefalu & Hu 2004). Trojmocná forma chromu (Cr³⁺) se nazývá glukózový toleranční faktor (GTF), který má značný vliv na inzulin v organismu. Mahdi (1996) odhalil, že nízký příjem chromu ve stravě souvisí s rizikem kardiovaskulárních onemocnění, narušením metabolismu sacharidů a dyslipidemií. Toxická a karcinogenní je inhalace šestimocné formy chromu (Cr⁶⁺) (Walter et al. 2008; Sun et al. 2015).

Koncentrace sodíku ve všech analyzovaných kávách byla pod detekčním limitem 399,2 mg.kg⁻¹. Množství sodíku v jednom šálku kávy je tedy méně než 2,79 mg. Dle tabulky 7 je sodík nejhojněji zastoupen v etiopských kávách. V ostatních analyzovaných oblastech byl v nižších koncentracích pod naší mezí detekce. Světová zdravotnická organizace (2012) na základě mnoha odborných studií doporučila konzumovat maximálně 2000 mg sodíku za den, což odpovídá 5 g kuchyňské soli. Vyšší dávky jsou rizikem pro zvýšení krevního tlaku a s tím související vznik kardiovaskulárních onemocnění (Grillo et al. 2019).

Obsah olova byl ve všech kávách pod mezí detekce 6,255 mg.kg⁻¹, což znamená koncentraci v jednom šálku kávy nižší než 0,04 mg. Koncentrace olova v kávě byla i ve všech studiích uvedených v tabulce 7 nižší než mez detekce. Dle Evropské komise (2006) je maximální povolené množství olova v potravinách 0,1 mg.kg⁻¹, což nebylo možné v analyzovaných kávách potvrdit ani vyvrátit. Zvýšený příjem olova může způsobit reprodukční dysfunkci, změny v gastrointestinálním traktu, nefropatii či Alzheimerovu chorobu. Dále může vést k anémii, protože inhibuje aktivaci hemu (Kurasaki et al. 2000; Rubio et al. 2005). Ovšem Santos et al. (2004) uvádí, že prostřednictvím konzumace kávy nehrozí žádné riziko spojené s expozicí olova.

Detekční limit stroncia byl 9,029 mg.kg⁻¹, což odpovídá maximálnímu obsahu 0,06 mg stroncia v jednom šálku kávy. Toxické příznaky po požití vysokých koncentrací stroncia prozatím nebyly u člověka popsány. Morohashi et al. (1994) ve své studii hledali farmakologickou dávku a toxickou dávku stroncia u potkanů. Dokázali, že dávka stroncia 7,67 mg.den⁻¹ (87,5 µmol.den⁻¹) má pozitivní dopad na metabolismus vápníku, naopak dávka stroncia 76,67 mg.den⁻¹ (875 µmol.den⁻¹) snížila koncentraci vápníku v kostech i v krevním séru. Pozitivní účinky potvrzuje i studie Nielsen (2004), která popisuje snížení bolestivosti kostí po podání stroncia laktátu u pacientů s osteoporózou potvrzené rentgenovými snímky dokazující zlepšení stavu kostí.

Křemík vykazoval detekční limit 6009 mg.kg⁻¹ a všechny analyzované kávy měly koncentraci pod mezí detekce. Produkt aktivace Si (²⁹Al) je radionuklid s krátkým poločasem přeměny (T_{1/2} = 6,6 min). Jelikož byly vzorky při krátkodobé aktivaci měřeny až 15 minut po ozáření kvůli interferující pozitronické lince 511 keV (velmi vysoké pozadí), nebylo téměř

možné jej v kávách stanovit. Potrubní pošta vybudovaná v mikrotronové laboratoři v Karlíně zajišťující rychlý transport analyzovaných vzorků z mikrotronu na detektor (Krausová 2015) stále není dokončena tak, aby umožňovala analýzy v řádu minut. Pomocí potrubní pošty by bylo možné stanovit krátkodobé radionuklidy, které nyní není možné stanovit kvůli jejich krátkému poločasu přeměny. Křemík má pozitivní dopad na kostní homeostázu a vykazuje stimulační účinky na syntézu chrupavky. V pojivových tkáních koncentrace klesá s rostoucím věkem a je vhodné jej doplňovat (Jugdaohsingh 2007). V devítiměsíční studii se 24 ženami byly prokázány pozitivní účinky silikátu na nehty a vlasy při dávce 9 mg denně (Wickett et al. 2007). Křemík se účastní syntézy kolagenu typu I a má tak pozitivní dopad na pružnost a elasticitu pokožky, což bylo potvrzeno studií Barel et al. (2005). Významným zdrojem biodostupného křemíku je pivo, ve kterém se jeho obsah zvyšuje se stupněm prokvašení (Krausová et al. 2014).

Obsah zinku v analyzovaných kávách byl nižší než detekční limit $963,6 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$. Dle tabulky 7 je koncentrace zinku v kávách z námi analyzovaných pěstebních oblastí v rozmezí $5,1\text{--}15,1 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$. To odpovídá obsahu maximálně $0,106 \text{ mg}$ zinku v jednom šálku kávy. Doporučená denní dávka zinku je dle Ministerstva zdravotnictví (2018) 10 mg . Konzumace čtyř šálků kávy denně pokrývá necelých 5 % doporučené denní dávky. Zinek je biogenní prvek nezbytný v organismu. Je kofaktorem více než tisíce enzymatických reakcí a je součástí mnoha transkripčních faktorů (Chasapis et al. 2012). Hraje zásadní roli při buněčném růstu, dělení a diferenciaci, je nezbytný pro endokrinní a imunitní systém, pro syntézu proteinů včetně RNA a DNA (Ackland & Michalczyk 2016). Nachází se ve většině tkání a v nejvyšším množství je ve varlatech, mozku, svalech, játrech a v kostech. Je přítomný v synaptických vezikulách, čímž ovlivňuje paměť (Glutsch et al. 2019).

Zbylé zkoumané prvky s koncentrací pod mezí detekce nemají významnější vliv na zdraví organismu. Ze všech popsaných prvků má konzumace kávy významný vliv na příjem draslíku, hořčíku a vápníku, což jsou biogenní prvky nezbytné pro správný chod organismu. Při konzumaci 4 šálků denně je pokryto doporučené denní množství draslíku z necelých 25 %, vápníku z 25 % a hořčíku z necelých 17 %. Zbylé nutričně významné prvky jsou v kávě v nižším množství, které je pro organismus také přínosné. Mezi námi osmi stanovenými prvky nebyl žádný, který by byl rizikový a snižoval tak přínos kávy ve stravě. Mezi patnácti prvky, které měly v naší práci obsah pod mezí detekce a není tak možné s jistotou potvrdit jejich přítomnost, byly rizikovými například olovo, baryum či chrom.

Mezi analyzovanými vzorky byly hledány rozdíly v obsahu prvků nejen na základě původu kávy, ale i na základě formy kávy. Mezi obsahem prvků v zrnkové kávě a v kávě z kapslí ovšem nebyl nalezen žádný statisticky významný rozdíl. Jiné výsledky by mohla přinést analýza nálevů káv, která nebyla provedena z časových důvodů způsobených celosvětovou pandemií COVID-19. Předpoklad, že z obalových kapslí přechází hliník do nápoje rozporuje studie Windisch et al. (2020), ve které nebyl prokázán statisticky významný rozdíl v obsahu hliníku v nápoji z kapsle a ve filtrátu ze zrnkové kávy. Obsah hliníku v kávě je nízký a přidáním mléka se jeho vstřebatelnost ještě snižuje (Fraňková et al. 2009). Analyzované rozdíly mezi kávami z malých pražičen a nadnárodních korporátů také nebyly statisticky významné.

7 Závěr

Předkládaná diplomová práce měla za cíl stanovit vybrané prvky v mleté kávě, které jsou pro člověka nutričně významné, nebo jsou rizikové a snižují tak přínos kávy ve stravě. Pro naplnění hlavního cíle bylo třeba provést literární rešerši zvolené problematiky, připravit vybraných 37 vzorků káv k analýze, provést samotné stanovení prvků a vyhodnotit a zpracovat naměřená data. Stanovení proběhlo pomocí instrumentální fotonové aktivační analýzy, což je radioanalytická metoda. Před vypracováním předložené práce byly stanoveny dvě hypotézy, z nichž byla jedna potvrzena.

První hypotéza o přítomnosti nutričně významných prvků byla potvrzena přítomností několika biogenních prvků, které jsou pro organismus nezbytné. Obsah draslíku, hořčíku a vápníku dokonce při průměrné konzumaci čtyř šálků denně pokrývá až desítky procent doporučené denní dávky.

Druhá hypotéza, že káva obsahuje rizikové prvky, které snižují její přínos pro stravu člověka, nebyla potvrzena. Mezi stanovenými prvky nebyl žádný prvek, který by byl rizikový či toxický. Mezi prvky pod mezí detekce bylo rizikové například baryum, olovo či chrom. Ovšem ani tyto prvky dle studií zabývajících se obdobnou problematikou nejsou v kávě v rizikovém množství.

Dle naší analýzy je pití 2–4 šálků káv denně z hlediska prvkového složení prospěšné pro zdraví organismu. Prospěšnost z hlediska jiných více jak tisíce přítomných látek v kávě byla potvrzena mnohými studiemi.

V předložené práci se bohužel nepodařilo stanovit korelaci prvků, na základě jejichž obsahu by bylo možné určení původu kávy. Rozmezí obsahů z jednotlivých oblastí se překrývala a statisticky významné rozdíly byly nalezeny pouze mezi Etiopií a Brazílií u hořčíku, rubidia a titanu. Nalezení korelace mezi dvěma prvky, na jejichž základě by bylo možné určení původu kávy, by bylo jistě přínosem nejen pro ověření původu a případného odhalení falšování kávy. Bylo by přínosem i pro odhalení nelegální činnosti pěstování zakázaných rostlin, které mají často podobné ideální pěstební podmínky jako kávovník.

Budoucí analýza mleté zrnkové kávy by mohla být provedena společně s analýzou filtrátu připravených z této kávy pro upřesnění přecházejících prvků do nápoje. Dále by bylo zajímavé provést analýzu zaměřující se pouze na rizikové prvky, aby bylo možné zcela vyvrátit jejich přítomnost v kávě či určit jejich skutečný obsah. Rizikové prvky v potravinách je důležité neustále sledovat z důvodu zdraví populace.

8 Literatura

- Abbaspour N, Hurrell R, Kelishadi R. 2014. Review on iron and its importance for human health. *Journal of Research in Medical Sciences*. **19**:164–174.
- Aburto NJ, Hanson S, Gutierrez H, Hooper L, Elliott P, Cappuccio FP. 2013. Effect of increased potassium intake on cardiovascular risk factors and disease: systematic review and meta-analyses. *BMJ* (e346) DOI: 10.1136/bmj.f1378.
- Ackland ML, Michalczyk AA. 2016. Zinc and infant nutrition. *Archives of Biochemistry and Biophysics*. **611**:51–57.
- Agarwal P, Brockman JD, Wang Y, Schneider JA, Morris MC, Squitti R. 2019. Brain Bromine Levels Associated with Alzheimer's Disease Neuropathology. *Journal of Alzheimer's Disease*. **46**:1–6.
- Andersen LF, Jacobs DR Jr, Carlsen MH, Blomhoff R. 2006. Consumption of coffee is associated with reduced risk of death attributed to inflammatory and cardiovascular diseases in the Iowa Women's Health Study. *The American Journal of Clinical Nutrition*. **83**:1039–1046.
- Anderson KA, Smith BW. 2002. Chemical Profiling To Differentiate Geographic Growing Origins of Coffee. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. **50**:2068–2075.
- Antol MN. 2002. Confession of a coffee bean: The complete guide to coffee cuisine. Square one publishers, New York.
- Arana VA, Medina J, Alarcon R, Moreno E, Heintz L, Schäfer H, Wist J. 2015. Coffee's country of origin determined by NMR: The Colombian case. *Food Chemistry*. **175**:500–506.
- Ashu R, Chandravanshi BS. 2011. Concentration levels of metals in commercially available Ethiopian roasted coffee powders and their infusions. *Bulletin of the Chemical Society of Ethiopia*. **25**:11–24.
- Augustín J. 2000. *Coffea arabica*. Produkcia, botanické zaradenie, nové obsahové a účinné látky a ich niektoré farmakologické účinky. *Česká a Slovenská farmacie*. **49**:107–112.
- Augustín J. 2003. Povídání o kávě (kávovníkové zrno, káva a kávoviny jako významné potravinářské pochutiny). Fontána, Olomouc.
- Augustín J. 2016. U kávy o kávě a kávovinách. JOTA, Brno.

- Bakuradze T, Boehm N, Janzowski C, Lang R, et al. 2011. Antioxidant-rich coffee reduces DNA damage, elevates glutathione status and contributes to weight control: results from an intervention study. *Molecular Nutrition & Food Research*. **55**:793–797.
- Barbosa RM, Batista BL, Varriquer RM, Coelho VA, Campiglia AD, Barbosa F. 2014. The use of advanced chemometric techniques and trace element levels for controlling the authenticity of organic coffee. *Food Research International*. **61**:246–251.
- Barel A, Calomme M, Timchenko A, De Paepe K, Demeester N, Rogiers V, Clarys P, Vanden BD. 2005. Effect of oral intake of choline-stabilized orthosilic acid on skin, nails and hair in women with photodamaged skin. *Archives of Dermatological Research*. **297**:147–153.
- Berglund F, Carlmark B. 2011. Titanium, Sinusitis, and the Yellow Nail Syndrome. *Biological Trace Element Research*. **143**:1–7.
- Brzoňová L. 2012. Jak poznáme kvalitu? Svět kávy. Sdružení českých spotřebitelů, Praha.
- BSCA. 2020. Regions. Brazilian Specialty Coffee Association. Available from www.brazilcoffeenation.com.br/ (accessed September 2020).
- Butt MS, Sultan MT. 2011. Coffee and its consumption: benefits and risks. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*. **51**:363–373.
- Cagliani LR, Pellegrino G, Giugno G, Consonni R. 2013. Quantification of *Coffea arabica* and *Coffea canephora* var. *robusta* in roasted and ground coffee blends. *Talanta*. **106**:169–173.
- Cao C, Wang L, Lin X, Mamcarz M, et al. 2011. Caffeine synergizes with another coffee component to increase plasma GCFS: linkage to cognitive benefits in Alzheimer's mice. *Journal of Alzheimer's Disease*. **25**:323–335.
- Caprioli G, Cortese M, Cristalli G, Maggi F, Odello L, Ricciutelli M, Sagratini G, Sirocchi V, Tomassoni G, Vittori S. 2012. Optimization of espresso machine parameters through the analysis of coffee odorants by HS-SPME–GC/MS. *Food Chemistry*. **135**:1127–1133.
- Catalani S, Rizzetti M, Padovani A, Apostoli P. 2012. Neurotoxicity of cobalt. *Human & Experimental Toxicology*. **31**:421–437.
- Cefalu WT, Hu FB. 2004. Role of chromium in human health and in diabetes. *Diabetes Care*. **27**:2741–2751.
- Clarke RJ, Macrae R. 1985. *Coffee Vol. 1: Chemistry*. Elsevier Applied Science, London.
- Clifford MN. 1999. Chlorogenic acids and other cinnamates nature, occurrence and dietary burden. *Journal of the Science of Food and Agriculture*. **79**:362–372.

- Collivignarelli MC, Abbà A, Benigna I, Sorlini S, Torretta V. 2018. Overview of the Main Disinfection Processes for Wastewater and Drinking Water Treatment Plants. Sustainability (e86) DOI: 10.3390/su10010086.
- Cooksey Ch. 2012. Health concerns of heavy metals and metalloids. Science Progress. **95**:73–88.
- Cormick G, Belizán JM. 2019. Calcium Intake and Health. Nutrients (e1606) DOI: 10.3390/nu11071606.
- Cornelis MC, El-Soheby A. 2007. Coffee, caffeine, and coronary heart disease. Current Opinion in Lipidology. **18**:13–19.
- ČSÚ. 2020. ČSÚ: Pohyb zboží přes hranice ČR. Český statistický úřad, Praha. Available from www.czso.cz (accessed August 2020).
- Dos Santos EJ, Oliveira ED. 2001. Determination of Mineral Nutrients and Toxic Elements in Brazilian Soluble Coffee by ICP-AES. Journal of food composition and analysis. **14**:523–531.
- Dos Santos JS, Dos Santos MLP, Conti MM. 2010. Comparative study of metal contents in Brazilian coffees cultivated by conventional and organic agriculture applying principal component analysis. Journal of the Brazilian Chemical Society. **21**:1468–1476.
- Dos Santos HD, Alvarenga YA, Boffo EF. 2019. ¹H NMR metabolic fingerprinting of Chapada Diamantina/Bahia (Brazil) coffees as a tool to assessing their qualities. Microchemical Journal (e152) DOI: 10.1016/j.microc.2019.104293.
- Duarte GS, Pereira AA, Farah A. 2010. Chlorogenic acids and other relevant compounds in Brazilian coffees processed by semi-dry and wet post-harvesting methods. Food Chemistry. **118**:851–855.
- Ellis DI, Brewster VL, Dunn WB, Allwood JW, Golovanov AP, Goodacre R. 2012. Fingerprinting food: current technologies for the detection of food adulteration and contamination. Chemical Society Review. **41**:5706–5727.
- Ellis DI., Goodacre R. 2016. Detecting food authenticity and integrity. Analytical Methods. **8**:3281–3283.
- Esechie H. 1992. Distribution of chemical constituents in the plant parts of six tropical-origin forage grasses at early anthesis. Journal of the Science of Food and Agriculture. **58**:435–438.
- Esteban-Díez I, González-Sáiz JM, Pizarro C. 2004 . An evaluation of orthogonal signal correction methods for the characterisation of arabica and robusta coffee varieties by NIRS. Analytica Chimica Acta. **514**:57–67.

El-Abassy RM, Donfack P, Materny A. 2011. Discrimination between Arabica and Robusta green coffee using visible micro Raman spectroscopy and chemometric analysis. *Food Chemistry*. **126**:1443–1448.

EURACHEM. 2012. *Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement*. CITAC, UK.

European Commission. 2006. Regulation (EC) No. 1881/2006 of 19 December 2006 Setting Maximum Levels for Certain Contaminants in foodstuffs. Pages 5-24 in *Official Journal of the European Union*, Luxembourg.

Filho AVR, Polito WL, Gomes Neto JA. 2007. Comparative studies of the sample decomposition of green and roasted coffee for determination of nutrients and data exploratory analysis. *Journal of the Brazilian Chemical Society*. **18**:47–53.

Fraňková A, Drábek O, Havlík J, Száková J, Vaněk A. 2009. The effect of beverage preparation method on aluminium content in coffee infusions. *Journal of Inorganic Biochemistry*. **103**:1480–1485.

Gagnon V, Rodrigue-Morin M, Tardif A, Beaudin J, Greer CHW, Shipley B, Bellenger JP, Roy S. 2020. Differences in elemental composition of tailings, soils, and plant tissues following five decades of native plant colonization on a gold mine site in Northwestern Québec. *Chemosphere* (e250) DOI: 10.1016/j.chemosphere.2020.126243.

Galeone C, Turati F, La Vecchia C, Tavani A. 2010. Coffee consumption and risk of colorectal cancer: a meta-analysis of case-control studies. *Cancer Causes Control*. **21**:1949–1959.

Giovannucci D, Leibovich J, Pizano D, Paredes G, Montenegro S, Arévalo H, Varangis P. 2002. Colombia coffee sector study. *Centro de Estudios Sobre Desarrollo Economico Documento*, Colombia.

Glutsch V, Hamm H, Goebeler M. 2019. Zinc and skin: an update. *Journal der Deutschen Dermatologischen Gesellschaft*. **17**:589–596.

Gogoasa I, Negrea A, Ciopec M, Berbecea A, Rada M, Bordean MD, Alda L, Moigradean D, Velcirov A, Alda S. 2017. Instant coffee as a source of calcium and magnesium. *Journal of Agroalimentary Processes and Technologies*. **23**:204–208.

Goldschein E. 2011. 11 incredible facts about the global coffee industry. *Business Insider*. Available from <https://www.businessinsider.com/> (accessed March 2020).

Green J, Zaijing S, Wells D, Maschner H. 2011. Using photon activation analysis to determine concentrations of unknown components in reference materials. *Application of Accelerators in Research and Industry*. **1336**:497-501.

- Grillo A, Salvi L, Coruzzi P, Salvi P, Parati G. 2019. Sodium Intake and Hypertension. *Nutrients* (e11) DOI: 10.3390/nu11091970.
- Habte G, Hwang IM, Kim JS, Hong JH, Hong YS, Choi JY, Nho EY, Jamila N, Khan N, Kim KS. 2016. Elemental profiling and geographical differentiation of Ethiopian coffee samples through inductively coupled plasma-optical emission spectroscopy (ICP-OES), ICP-mass spectrometry (ICP-MS) and direct mercury analyzer (DMA). *Food Chemistry*. **212**:512–520.
- Handbook. 2000. Handbook on photonuclear data for applications, Cross section and spectra, IAEA-TECDOC 1178. Internatioanl Atomic Energy Agency, Vienna.
- Hemmerle H, Burger HJ, Below P, Schubert G, et al. 1997. Chlorogenic acid and synthetic chlorogenic acid derivatives: novel inhibitors of hepatic glucose-6-phosphate translocase. *Journal of Medicinal Chemistry*. **40**:137–145.
- Herbstman JB, Sjodin A, Kurzon M, Lederman SA, Jones RS, Rauh V, Needham LL, Tang D, Niedzwiecki M, Wang RY, Perera F. 2010. Prenatal exposure to PBDEs and neurodevelopment. *Environ Health Perspect* **118**: 712–719.
- Hevia K, Arancibia V, Rojas-Romo C. 2015. Levels of copper in sweeteners, sugar, tea, coffee and mate infusions. Determination by adsorptive stripping voltammetry in the presence of α -lipoic acid. *Microchemical Journal*. **119**:11–16.
- Hirons M, Mehrabi Z, Gonfa TA, Morel A, Gole TW, McDermott C, Norris K. 2018. Pursuing climate resilient coffee in Ethiopia – A critical review. *Geoforum*. **91**:108–116.
- Hopfenzitz P. 1999. Minerální látky. Ikar, Praha.
- Chadwick J, Goldhaber M. 1935. The nuclear photoelectric effect. *Proceedings of the Royal Society of London*. **151**:479–493.
- Champagne CM. 2008. Magnesium in Hypertension, Cardiovascular Disease, Metabolic Syndrome, and Other Conditions: A Review. *Nutrition in Clinical Practice*. **23**:142–151.
- Chasapis CT, Loutsidou AC, Spiliopoulou CA, Stefanidou ME. 2012. Zinc and human health: an update. *Archives of Toxicology*. **86**:521–534.
- Chen LW, Wu Y, Neelakantan N, Chong MFF, Pan A, Dam RM. 2014. Maternal caffeine intake during pregnancy is associated with risk of low birth weight: a systematic review and dose–response meta-analysis. *BMC Medicine*. **12**:174–186.
- Cheng X, Zhou YC, Zhou B, Huang YC, Wang GZ, Zhou GB. 2019. Systematic analysis of concentrations of 52 elements in tumor and counterpart normal tissues of patients with non-small cell lung cancer. *Cancer Medicine*. **8**:7720–7727.

Chu YF, Brown PH, Lyle BJ, Chen Y, et al. 2009. Roasted coffees high in lipophilic antioxidants and chlorogenic acid lactones are more neuroprotective than green coffees. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. **57**:9801–9808.

Chvátíl D, Vognar M, Krist P. 2008. Mikrotron MT-25 – zdroj tvrdého záření gama. Pages 26 – 29 in *Sborník přednášek semináře Radioanalytické metody IAA 07. Spektroskopická společnost J. M. Marci, Praha*.

IAEA. 2004. Quantifying uncertainty in nuclear analytical measurements. International Atomic Energy Agency, Vienna.

ICO. 2020. Trade statistics tables: Production. ICO, London. Available from www.ico.org (accessed June 2020).

Iwai N, Ohshiro H, Kurozawa Y, Hosoda T, et al. 2002. Relationship between coffee and green tea consumption and all-cause mortality in a cohort of a rural Japanese population. *American Journal of Epidemiology*. **12**:191–198.

Jaganyi D, Madlala SP. 2000. Kinetics of coffee infusion: a comparative study on the extraction kinetics of mineral ions and caffeine from several types of medium roasted coffees. *Journal of the Science of Food and Agriculture*. **80**:85–90.

James PE. 1932. The Coffee Lands of Southeastern Brazil. *Geographical Review*. **22**:225–244.

Jaquet M, Rochat I, Moulin J, Cavin C, Bibiloni R. 2009. Impact of coffee consumption on the gut microbiota: a human volunteer study. *International Journal of Food Microbiology*. **130**:117–121.

Jarošová M, Milde D, Kuba M. 2014. Elemental Analysis of Coffee: a Comparison of ICP-MS and AAS Methods. *Czech Journal of Food Sciences*. **32**:354–359.

Johnson GT, Lewis TR, Wagner WD. 1975. Acute toxicity of cesium and rubidium compounds. *Toxicology and applied pharmacology*. **32**:239–245.

Jones K, Morton J, Smith I, Jurkschat K, Harding AH, Evans G. 2015. Human in vivo and in vitro studies on gastrointestinal absorption of titanium dioxide nanoparticles. *Toxicology Letters*. **233**:95–101.

Jugdaohsingh, R. 2007. Silicone and bone health. *The Journal of Nutrition, Health and Aging*. **11**:99–110.

Jumhawan U, Putri SP, Yusianto Y, Marwanni E, Bamba T, Fukusaki E. 2013. Selection of discriminant markers for authentication of Asian palm civet coffee (Kopi Luwak): A metabolomics approach. *Journal of Agriculture and Food Chemistry*. **61**:7994–8001.

- Kadlec J. 1936. Káva. Nakladatelství M. Knapp, Praha.
- Koebler Jason. 2013. Buzzkill? How Climate Change Could Eventually End Coffee. US News, New York City. Available from www.usnews.com (accessed August 2020).
- Krausová I, Mizera J, Řanda Z, Horák Z, Chvátíl D, Krist P. 2013. Možnosti instrumentální fotonové aktivační analýzy s použitím mikrotronu MT-25. *ChemZi*. **9**:148.
- Krausová I, Cejnar R, Kučera J, Dostálek P. 2014. Impact of the brewing process on the concentration of silicon in lager beer. *Journal of the Institute of Brewing*. **120**:433–437.
- Krausová I. 2015. Krátkodobé produkty fotojaderných reakcí na mikrotronu a jejich využití ve fotonové aktivační analýze [disertační práce]. České vysoké učení technické v Praze, Praha.
- Krausová I, Mizera J, Řanda Z, Chvátíl D, Krist P. 2015. Nondestructive assai of fluorine in geological and other materials by instrumental photon activation analysis with a microtron. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. **342**:82–86.
- Krausová I, Mizera J, Dostálek P, Řanda Z. 2018. Nondestructive determination of nitrogen in malting barleys by instrumental photon activation analysis and its comparison with the Dumas method. *Journal of the Institute of Brewing*. **124**:4–8.
- Krausová I, Tajer J, Světlík I, Chvátíl D. 2019. Matrix determination of Bronze Age bracelet via nitrogen assay by instrumental photon activation analysis and radiocarbon dating of its exact age. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. **448**:26–30.
- Krejčí I. 2000. O kávě a čaji. Grada Publishing, Praha.
- Krist P, Horák Z, Mizera J, Chvátíl D, Vognar M, Řanda Z. 2014. Innovations at the MT 25 microtron aimed at applications in photon activation analysis. *Journal of Radioanalytical and Nucleat Chemistry*. **304**:183–188.
- Krivan V, Barth P, Morales AF. 1993. Multielement analysis of green coffee and its possible use for the determination of origin. *Mikrochimica Acta*. **110**:217–236.
- Kučera J. 2018. Activation analysis in Czechoslovakia and in the Czech Republic: more than 50 years od activities. *Journal of Radioanalytical and Nucleat Chemistry*. **318**:1473–1492.
- Kurasaki M, Hartoto DI, Saito T, Suzuki-Kurasaki M, Iwakuma T. 2000. Metals in water in the Central Kalimantan, Indonesia. *Bull. EnViron. Contam. Toxicol*. **65**:591–597.

Ky CL, Louarn J, Dussert S, Guyot B, Hamon S, Noirot M. 2001. Caffeine, trigonelline, chlorogenic acids and sucrose diversity in wild *Coffea arabica* L. and *C. canephora* P. accessions. *Food chemistry*. **75**:223–230.

Lošák T, Čermák P, Hlušek J. 2012. Changes in fertilisation and liming of soils of the Czech Republic for the past 20 years. *Archives of Agronomy and Soil Science*. **58**:238–242.

Lutz GJ, De Soete DA. 1968. Determination of carbon in sodium by photon activation analysis. *Analytical Chemistry*. **40**:820–822.

Lutz GJ. 1969. Calculation of sensitivities in photon activation analysis. *Analytical Chemistry*. **41**:424–427.

Lutz GJ. 1971. Photon activation analysis – A review. *Analytical Chemistry*. **43**:93–103.

Mádlíková M, Krausová I, Mizera J, Táborský J, Faměra O, Chvátíl D. 2018. Nitrogen assay in winter wheat by short-time instrumental photon activation analysis and its comparison with the Kjeldahl method. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. **317**:479–486.

Mahdi GS. 1996. Chromium Deficiency Might Contribute to Insulin Resistance, Type 2 Diabetes Mellitus, Dyslipidemia, and Atherosclerosis. *Diabetic Medicine*. **13**:389–390.

Majer V, Beneš P, Gosman A, Kratzer K, Zeman A. 1985. *Základy užití jaderné chemie*. SNTL, Praha.

Mandžuková J. 2005. *Léčivá síla vitaminů, minerálů a dalších látek*. Start, Benešov.

Martín M, Pablos F, González A. 1999. Characterization of arabica and robusta roasted coffee varieties and mixture resolution according to their metal content. *Food Chemistry*. **66**:365–370.

Medina DA, Laine AM. 2011. *Food Quality: Control, Analysis and Consumer Concerns*. Nova Publishers, New York.

Meltzer HL, Taylor RM, Platman SR, Fieve RR. 1969. Rubidium: a potential modifier of affect and behaviour. *Nature*. **223**:321–322.

Mesas AE, Leon-Muñoz LM, Rodriguez-Artalejo F, Lopez-Garcia E. 2011. The effect of coffee on blood pressure and cardiovascular disease in hypertensive individuals: a systematic review and meta-analysis. *American Journal of Clinical Nutrition*. **94**:1113–1126.

Ministerstvo zdravotnictví. 2009. Vyhláška, kterou se mění vyhláška č. 225/2008 Sb., kterou stanoví požadavky na doplňky stravy a na obohacování potravin. Pages 4910–4911 in *Sbírka zákonů České republiky, 2009, částka 110*. Česká republika.

Ministerstvo zdravotnictví. 2018. Vyhláška ze dne 2. března 2018, kterou se mění vyhláška č. 54/2004 Sb., o potravinách určených pro zvláštní výživu a o způsobu jejich použití, ve znění pozdějších předpisů. Pages 362–366 in Sběrka zákonů České republiky, 2018, částka 20. Česká republika.

Ministerstvo životního prostředí. 2016. Vyhláška č. 153/2016 Sb. ze dne 9. května 2016 o stanovení podrobností ochrany kvality zemědělské půdy a o změně vyhlášky č. 13/1994 Sb., kterou se upravují některé podrobnosti ochrany zemědělského půdního fondu. Pages 2692–2699 in Sběrka zákonů České republiky, částka 59. Česká republika.

Mizera J, Řanda Z. 2010. Instrumental neutron and photon activation analyses of selected geochemical reference materials. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. **284**:157–163.

Mohan S, Gemech F, Reeves A, Struthers J. 2014. The welfare gain from eliminating coffee price volatility: The case of indian coffee producers. *The Journal of Developing Areas*. **48**:57–72.

Mohsen IH, Mohsen AH, Zaidan HK. 2019. Health effects of chlorinated water: a review article. *Pakistan Journal of Biotechnology*. **16**:163–167.

Morohashi T, Sano T, Yamada S. 1994. Effects of Strontium on Calcium Metabolism in Rats. I. A Distinction between the Pharmacological and Toxic Doses. *The Japanese Journal of Pharmacology*. **64**:155–162.

Murthy PS, Manonmani HK. 2009. Physico-chemical, antioxidant and antimicrobial properties of Indian monsooned coffee. *European Food and Research Technology*. **229**:645–650.

Nielsen SP. 2004. The biological role of strontium. *Bone*. **35**:583–588.

Nies DH. 1999. Microbial heavy-metal resistance. *Applied Microbiology and Biotechnology*. **51**:730–750.

Oleszczuk N, Castro J, Dasilva M, Korn M, Welz B, Vale M. 2007. Method development for the determination of manganese, cobalt and copper in green coffee comparing direct solid sampling electrothermal atomic absorption spectrometry and inductively coupled plasma optical emission spectrometry. *Talanta*. **73**:862–869.

Oliveira M, Ramos M, Delerue-Matos C, Morais S. 2015. Espresso beverages of pure origin coffee: Mineral characterization, contribution for mineral intake and geographical discrimination. *Food Chemistry*. **177**:330–338.

Pandey G, Mahuri S. 2014. Heavy Metals Causing Toxicity in Animals and Fishes. *Research Journal of Animal, Veterinary and Fishery Sciences*. **2**:17–23.

- Pánek J, Pokorný J, Dostálová J, Kouhout P. 2002. *Základy výživy*. Svoboda servis, Praha.
- Parlament České republiky. 1997. Zákon o potravinách a tabákových výrobcích a o změně a doplnění některých souvisejících zákonů. Pages 2178–2188 in *Sbírka zákonů České republiky*, 2018, částka 38. Česká republika.
- Paschalis C, Jenner FA, Lee CR. 1978. Effects of rubidium chloride on the course of manic-depressive illness. *Journal of the Royal Society of Medicine*. **71**:343–352.
- Pohl P, Stelmach E, Welna M, Szymczycha-Madeja A. 2012. Determination of the Elemental Composition of Coffee Using Instrumental Methods. *Food Analytical Methods*. **6**:598–613.
- Poole R, Kennedy OJ, Roderick P, Fallowfield JA, Hayes PC, Parkes J. 2017. Coffee consumption and health: umbrella review of meta-analyses of multiple health outcomes. *BMJ* (e5024) DOI: 10.1136/bmj.j5024.
- Qian CH, Zhigou H, Yuting Z, Shuzhen L, Wenjing Y, Liang H, Hui Z. 2021. Rubidium chloride modulated the fecal microbiota community in mice. *BMC Microbiology* (e21) DOI: 10.21203/rs.3.rs-23792/v1.
- Riksen NP, Zhou Z, Oyen WJG, Jaspers R, Ramakers BP, Brouwer RMHJ, Boerman OC, Steinmetz N, Smits P, Rongen G. 2006. Caffeine prevents protection in two human models of ischemic preconditioning. *Journal of the American College of Cardiology*. **48**:700–707.
- Rosanoff A. 2013. The high heart health value of drinking-water magnesium. *Medical Hypotheses*. **81**:1063–1065.
- Rubio C, González-Iglesias T, Revert C, Reguera JI, Gutiérrez AJ, Hardisson A. 2005. Lead Dietary Intake in a Spanish Population (Canary Islands). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. **53**:6543–6549.
- Řanda Z, Špaček B, Kuncíř J, Benada J. 1981. Nondestruktive gama activation analysis of mineral materials. Nuclear Information Centre, Prague.
- Řanda Z, Kreisinger F. 1983. Tables of nuclear constants for gamma activation analysis. *Journal of Radioanalytical Chemistry*. **77**:279–495.
- Řanda Z, Frána J, Mizera J, Kučera J, Novák JK, Ulrych J, Belov AG, Maslov OD. 2007. Instrumental neutron and photon activation analyses in geochemical study of phonolitic and trachytic rocks. *Geostandards and Geoanalytical Research*. **31**:275–283.
- Santos EE, Lauria DC, Porto da Silveira CL. 2004. Assessment of daily intake of trace elements due to consumption of foodstuffs by adult inhabitants of Rio de Janeiro city. *Science of The Total Environment*. **327**:69–79.

Segebade C, Lutz GJ, Weise HP. 1977. Quantitative evaluation of interference reactions in photon activation analysis. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. **39**:179–184.

Segebade C, Weise HP, Lutz GJ. 1988. *Photon activation analysis*. Walter de Gruiter, Berlin.

Segebade C, Berger A. 2008. *Photon activation analysis, encyclopedia of analytical chemistry*. John Wiley & Sons Ltd, New York.

Sevcan Ş, Selda M, Murat Y, Münevver A. 2017. Elemental composition of green coffee and its contribution to dietary intake. *Food Chemistry*. **215**:92–100.

Sheikhi R, Mahvi AH, Baghani AN, Hadi M, Sorooshian A, Delikhoon M, Golbaz S, Dalvand A, Johar F, Ghalhari MR. 2020. Reducing free residual chlorine using four simple physical methods in drinking water: effect of different parameters, monitoring microbial regrowth of culturable heterotrophic bacteria, and kinetic and thermodynamic studies. *Toxin Reviews* (e1556) DOI: 10.1080/15569543.2020.1726959.

SCHER. 2012. *Assessment of the tolerable daily intake of barium*. European Commission, Brussel. Available from www.ec.europa.eu (accessed March 2021).

Schroeder HA, Balassa JJ, Tipton IH. 1966. Essential trace elements in man: manganese. *Journal of Chronic Disease*. **19**:545–571.

Singh S, Oswal M, Behera BR, Kumar A, Santra S, Acharya R, Singh KP. 2020. PIXE analysis of green and roasted coffee beans and filter coffee powder for the inter-comparison study of major, minor and trace elements. *AIP Conference Proceedings* (e2220) DOI: 10.1063/5.0001751.

Sun ZJ, Wells DP, Segebade C, Maschner H, Benson B. 2013. A provenance study of coffee by photon activation analysis. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. **296**:293–299.

Sun H, Brocato J, Costa M. 2015. Oral Chromium Exposure and Toxicity. *Metals and Health*. **2**:295–303.

Swanson CHA. 2003. Iron intake and regulation: implications for iron deficiency and iron overload. *Alcohol*. **30**:99–102.

SZPI. 2015. *Prezentace SZPI v Poslanecké sněmovně Parlamentu ČR: Falšování potravin - aktuální problém?* SZPI, Brno. Available from www.szpi.gov.cz (accessed August 2020).

Teuber R. 2010. Geographical Indications of Origin as a Tool of Product Differentiation: The Case of Coffee. *Journal of International Food & Agribusiness Marketing*. **22**:277–298.

Thorn J. 2001. *Káva – příručka pre labužníkov*. Fortuna Libri, Bratislava.

- Ukers HW. 1922. All About Coffee. The tea and coffee trade journal company, Cambridge
- Van Leeuwen FXR, Sangster B, Hildebrandt AG. 1987. The Toxicology of Bromide Ion. *Critical Reviews in Toxicology*. **18**:189–213.
- Vega-Carrillo HR, Iskander FY, Manzanares-Acuna E. 2002. Elemental content in ground and soluble/instant coffee. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. **252**:75–80.
- Velíšek J, Hajšlová J. 2009. *Chemie potravin I*. Osis, Tábor.
- Vognar M, Šimáně Č, Chvátíl D. 2003. Twenty years of microtron laboratory activities at CTU in Prague. *Acta Polytechnica*. **43**:50–58.
- Walter LR, Marel E, Harbury R, Wearne J. 2008. Distribution of Chromium and Cobalt Ions in Various Blood Fractions After Resurfacing Hip Arthroplasty. *The Journal of Arthroplasty*. **23**:814–821.
- Wang J, et al. 2007. Acute toxicity and biodistribution of different sized titanium dioxide particles in mice after oral administration. *Toxicology Letters*. **168**:176–185.
- Wei F, Furihata K, Koda M, Hu F, Kato R, Miyakawa T, Tanokura M. 2012. ¹³C NMR-Based Metabolomics for the Classification of Green Coffee Beans According to Variety and Origin. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. **60**:10118–10125.
- Wellman FL. 1961. *Coffee: Botany, cultivation and utilization*. Interscience Publisher, New York.
- Wickett RR, Kossmann E, Barel A, Demeester N, Clarys P, Vanden BD, Calomme M. 2007. Effect of oral intake of choline-stabilized orthosilic acid on hair tensile strength and morphology in women with fine hair. *Archives of Dermatological Research*. **299**:499–505.
- WHO, FAO. 2004. *Vitamin and mineral requirements in human nutrition*. WHO, Rome.
- WHO. 2009. *Calcium and Magnesium in Drinking-water: Public health significance*. World Health Organization, Geneva.
- WHO. 2012. *Guideline: sodium intake for adults and children*. World Health Organization, Geneva.
- Windisch J, Keppler BK, Jirsa F. 2020. Aluminum in Coffee. *ACS Omega*. **5**:15335–15343.
- Wintgens JN. 2004. *Coffee: Growing, Processing, Sustainable Production: A Guidebook for Growers, Processors, Traders, and Researchers*. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, Berlin.

Zadák Z. 2008. Výživa v intenzivní péči. Grada Publishing, Praha.

Zaidi JH, Fatima I, Arif M, Qureshi IH. 2006. Determination of trace elements in coffee beans and instant coffee of various origins by INAA. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. **267**:109–112.

Zrůst J. 2003. Riziko pěstování brambor v půdách kontaminovaných toxickými kovy. Vědecký výbor fyto-sanitární a životního prostředí, Výzkumný ústav rostlinné výroby, Praha. Available from www.phytopsanitary.org (accessed March 2021).

Žáček Z. 1981. Nad šálkem plným vůně. Merkur, Praha.

9 Seznam tabulek, obrázků a grafů

- Tabulka 1 Roční produkce kávy v letech 2015 až 2018 dle zemí, uvedeno v tisících 60kg pytlích (zpracováno dle ICO 10. 6. 2020)
- Tabulka 2 Obsah minerálních látek v těle dospělého člověka o hmotnosti 70 kg (Velíšek & Hajšlová 2009)
- Tabulka 3 Maximální denní dávky vybraných prvků za den (Pandey & Madhuri 2014)
- Tabulka 4 Indikační hodnoty rizikových prvků (Ministerstvo životního prostředí 2016)
- Tabulka 5 Porovnání DDD v České republice dle Ministerstva zdravotnictví (2018) a RDI dle WHO & FAO (2004)
- Tabulka 6 Koncentrace prvků ve vzorcích kávy v jednotkách mg.kg^{-1} , stanoveno pomocí PIXE (Singh et al. 2020)
- Tabulka 7 Obsah prvků v kávě zelené, pražené a instantní a v kávě z Brazílie, Etiopie, Indie a Kolumbie
- Tabulka 8 Hlavní fyzikální parametry mikrotronu MT-25 (Chvátil et al. 2008)
- Tabulka 9 Seznam analyzovaných vzorků
- Tabulka 10 Hmotnost vzorků káv před vysušením a po vysušení
- Tabulka 11 Stanovené prvky, příslušné radionuklidy a fotojaderné reakce vedoucí k jejich vzniku
- Tabulka 12 Detekční limity prvků v mg.kg^{-1} vyhodnocené programem Genie 2000
- Tabulka 13 Srovnání certifikovaných hodnot ($\text{mg.kg}^{-1} \pm \sigma$) a stanovených koncentrací prvků ($\text{mg.kg}^{-1} \pm U$) v referenčním materiálu Granite G-SN
- Tabulka 14 Výpočet intenzity záření dopadajícího na vzorky při ST IPAA
- Tabulka 15 Scheffého test pro hořčík (Statistica CZ 12)
- Tabulka 16 Scheffého test pro rubidium (Statistica CZ 12)
- Tabulka 17 Scheffého test pro titan (Statistica CZ 12)
- Tabulka 18 Průměrné koncentrace prvků (mg.kg^{-1}) dle typu kávy
- Tabulka 19 Dvouvýběrový t-test pro nezávislé vzorky kávy zrnkové a kapslové
- Tabulka 20 Průměrné koncentrace prvků (mg.kg^{-1}) v kávách z nadnárodních korporací (NK) a menších pražírén
- Tabulka 21 Dvouvýběrový t-test pro nezávislé vzorky káv z nadnárodních korporací (NK) a menších pražírén
- Obrázek 1 Průřez plodem kávovníku (Wintgens 2004)
- Obrázek 2 Přehled prvků stanovitelných ST, LT či jejich kombinací ST+LT na mikrotronu MT-25 (Krausová 2015)
- Obrázek 3 Mikrotron MT-25 v mikrotronové laboratoři ÚJF AV ČR, v.v.i
- Graf 1 Stanovená koncentrace vápníku (mg.kg^{-1}) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy
- Graf 2 Stanovená koncentrace chloru (mg.kg^{-1}) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy
- Graf 3 Stanovená koncentrace draslíku (mg.kg^{-1}) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy

- Graf 4 Stanovená koncentrace železa (mg.kg^{-1}) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy
- Graf 5 Stanovená koncentrace hořčíku (mg.kg^{-1}) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy
- Graf 6 Stanovená koncentrace manganu (mg.kg^{-1}) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy
- Graf 7 Stanovená koncentrace rubidia (mg.kg^{-1}) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy
- Graf 8 Stanovená koncentrace titanu (mg.kg^{-1}) s rozšířenou kombinovanou nejistotou ve vzorcích kávy
- Graf 9 Stanovené průměrné koncentrace sledovaných prvků (mg.kg^{-1}) seskupené dle původu
- Graf 10 Stanovené průměrné koncentrace (mg.kg^{-1}) chloru, titanu, manganu, železa a rubidia seskupené dle původu
- Graf 11 Korelace obsahu titanu a obsahu hořčíku v analyzovaných kávách

10 Seznam použitých zkratek a symbolů

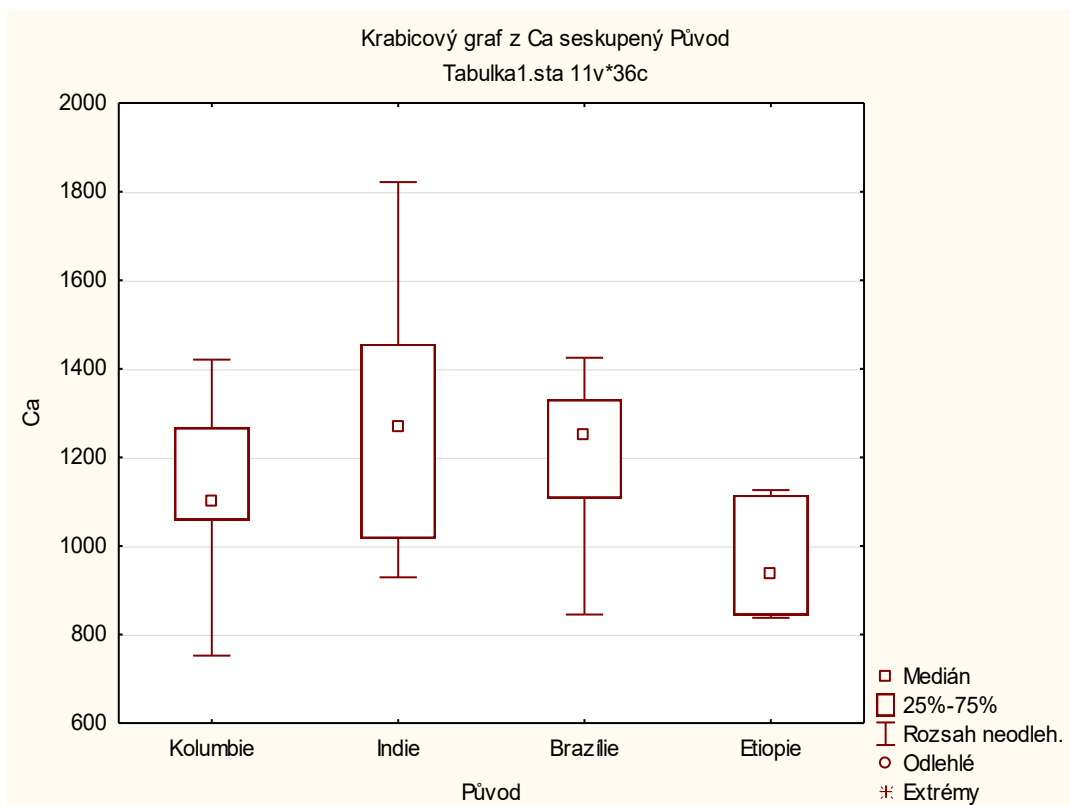
AAS	Atomová absorpční analýza
ABIC	Brazilská asociace kávového průmyslu
AES	Atomová emisní analýzy
ANOVA	Analýza rozptylu
ATSRD	Agentura pro toxické látky a registr nemocí
DDD	Doporučená denní dávka
DNA	Deoxyribonukleová kyselina
EC	Elektronový záchyt
GC-MS	Plynová chromatografie s hmotnostní spektrometrií
HDL	Vysokodenzitní lipoprotein
HPGe	Superčisté germanium
IAEA	Mezinárodní agentura pro atomovou energii
IARC	Mezinárodní agentura pro výzkum rakoviny
ICO	Mezinárodní organizace pro kávu
IPAA	Instrumentální fotonová aktivační analýza
LDL	Nízkodenzitní lipoprotein
LT IPAA	Dlouhodobá instrumentální fotonová aktivační analýza
MD	Mez detekce
NAA	Neutronová aktivační analýza
NIRS	Blízká infračervená spektroskopie
NMR	Nukleární magnetická rezonance
PAA	Fotonová aktivační analýza
PIXE	Částicemi indukovaná spektrometrie
QC	Kontrola kvality
RDI	Doporučená denní dávka
RM	Referenční materiál
RNA	Ribonuklová kyselina
SCHER	Vědecký výbor pro zdravotní a environmentální rizika
ST IPAA	Krátkodobá instrumentální fotonová aktivační analýza
TDI	Tolerovatelná denní dávka
U	Rozšířená kombinovaná nejistota
σ	Směrodatná odchylka

11 Samostatné přílohy

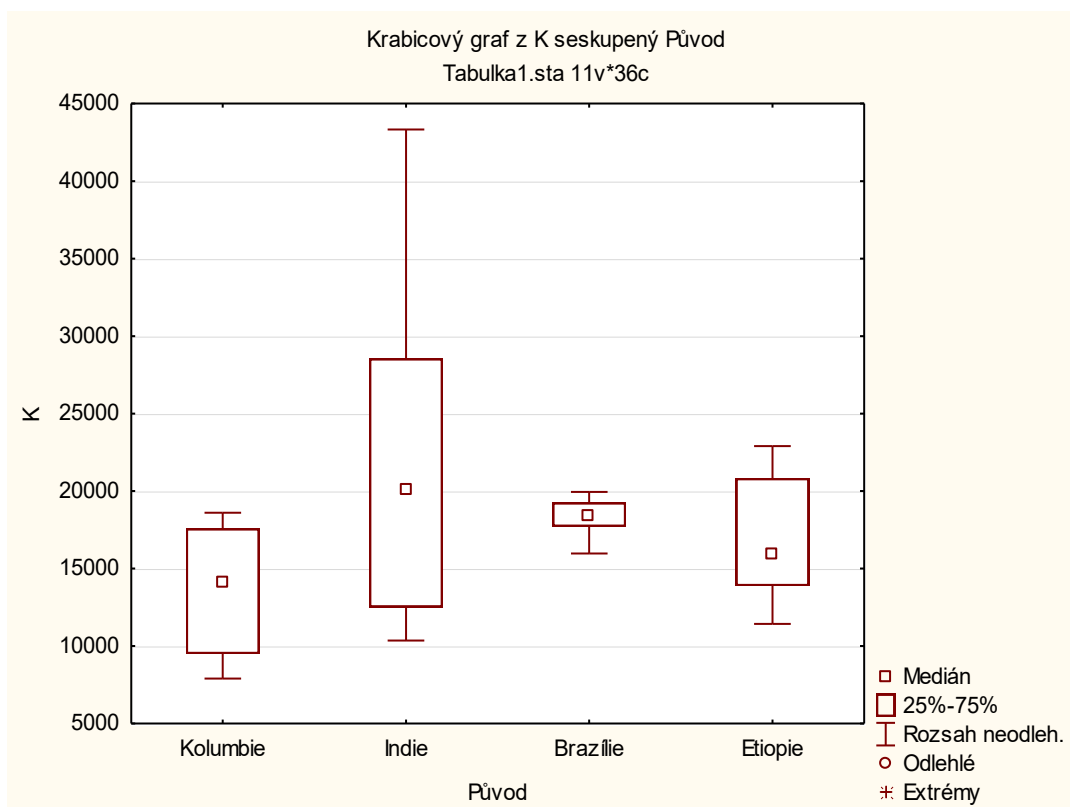
Příloha 1 Stanovené koncentrace prvků ve vzorcích s rozšířenou nejistotou v mg.kg⁻¹, u vynechaných hodnot byla koncentrace pod mezí detekce

Prvek/ Vzorek	Ca	Cl	K	Fe	Mg	Mn	Rb	Ti
1	1099,84 ± 441,36		13694 ± 2584		2300,0 ± 145,8		25,13 ± 4,85	8,42 ± 4,67
2		105,24 ± 64,78	19250 ± 2373		2245,0 ± 164,9		12,40 ± 3,13	34,38 ± 17,23
3	1424,85 ± 445,93		19085 ± 4320	124,92 ± 53,75	2349,5 ± 150,1		27,94 ± 4,80	16,96 ± 5,42
4	938,83 ± 422,83		13883 ± 1659		2003,1 ± 154,3		33,41 ± 5,87	20,46 ± 12,88
5	1153,30 ± 564,47	301,06 ± 123,42	20292 ± 1490		2083,3 ± 170,1	114,24 ± 22,27	33,10 ± 4,60	75,29 ± 19,52
6			12172 ± 0937		2059,0 ± 168,5		22,86 ± 5,90	30,90 ± 13,55
7	892,59 ± 369,48		18366 ± 0955		2151,2 ± 142,2		24,72 ± 5,01	19,64 ± 5,62
8	1058,66 ± 360,02		17127 ± 1412	178,55 ± 67,62	2114,4 ± 140,1	36,84 ± 15,13	15,77 ± 4,83	22,69 ± 6,15
9	1248,85 ± 382,30		18050 ± 3979		2579,2 ± 161,2		20,25 ± 4,43	24,55 ± 5,93
10	844,30 ± 491,19		11434 ± 0847		1991,1 ± 160,2		15,28 ± 3,11	35,89 ± 14,65
11	1137,55 ± 359,06		19416 ± 4185	124,95 ± 64,89	2096,2 ± 139,2		14,33 ± 4,03	27,55 ± 7,37
12			15911 ± 1137		2056,7 ± 164,0		35,05 ± 5,71	
13	1126,10 ± 614,03		15013 ± 1055		2004,2 ± 161,2	42,03 ± 13,16	40,09 ± 4,90	
14	845,09 ± 324,25	249,41 ± 90,04	17377 ± 4674		2336,5 ± 151,0		21,95 ± 4,94	22,18 ± 6,10
15	1114,25 ± 361,66		16721 ± 1665		2321,6 ± 153,1		31,81 ± 5,26	29,40 ± 6,96
16	1821,40 ± 714,07	239,81 ± 77,91	21033 ± 2164		2229,8 ± 164,5		21,68 ± 5,06	
17	1259,50 ± 455,46		27792 ± 1986		2122,4 ± 158,0		20,01 ± 3,56	42,30 ± 15,40
18			16070 ± 1114		2078,9 ± 162,6		30,74 ± 5,81	
19	1078,20 ± 358,09		18723 ± 4737		2431,6 ± 154,9		15,48 ± 4,30	22,49 ± 6,48
20	1267,10 ± 378,60		9203,8 ± 1441		2235,3 ± 149,9		20,98 ± 5,16	23,49 ± 6,71
21	1455,90 ± 575,41		29304 ± 1800		2094,5 ± 154,9		21,35 ± 3,57	
22	1307,90 ± 563,52	248,38 ± 70,40	10354 ± 1408		2175,5 ± 165,7		32,05 ± 6,07	29,91 ± 16,67
23	837,90 ± 590,67		22898 ± 1826		2065,2 ± 171,9		16,47 ± 4,96	41,51 ± 15,78

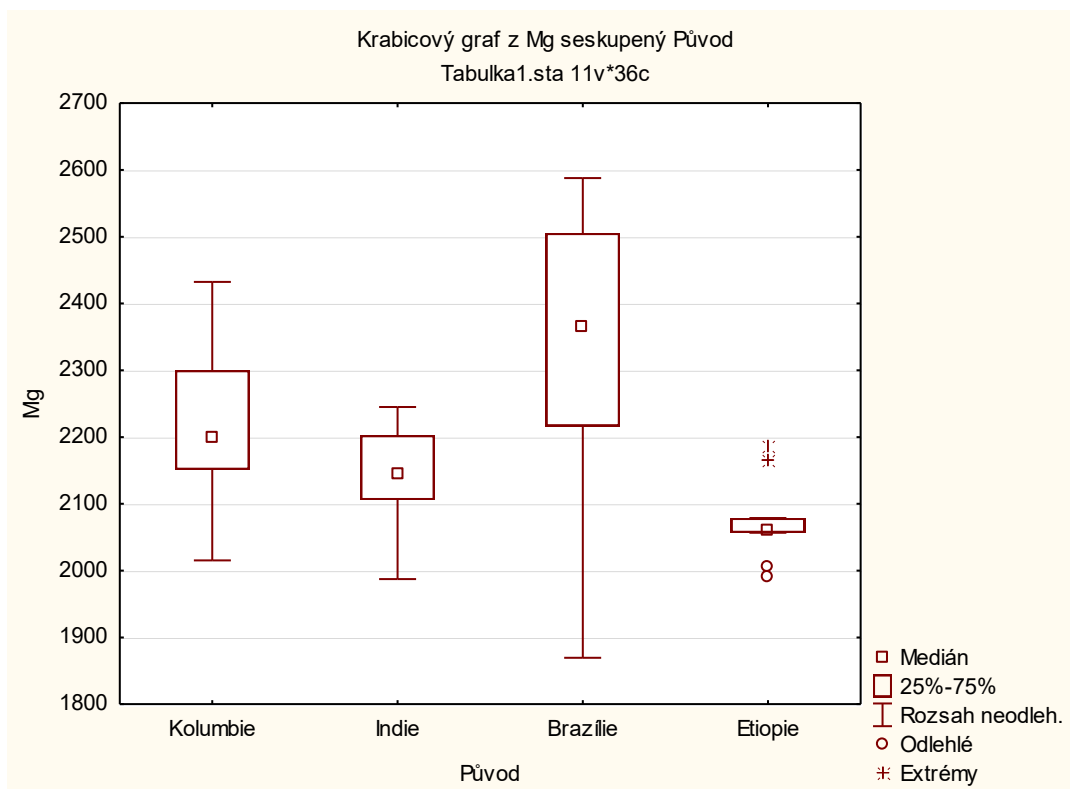
24			20818 ± 1607	2165 ± 174,9		41,06 ± 5,06	38,34 ± 18,95
25	1249,25 ± 376,48	271,14 ± 103,39	19953 ± 4910	2383,5 ± 156,4		6,81 ± 3,27	24,47 ± 6,20
26	1253,91 ± 377,39		18059 ± 4380	1869,4 ± 134,5		21,63 ± 4,70	20,97 ± 6,13
27	1421,00 ± 396,29		7900,5 ± 1187	2432,3 ± 161,5		27,84 ± 4,93	31,13 ± 7,59
28	725,49 ± 313,58		9500,1 ± 1325	2193,6 ± 150,3		9,18 ± 3,18	26,42 ± 6,97
29	1017,00 ± 552,51	333,56 ± 89,13	11546 ± 1476	1987,3 ± 162,3	34,94 ± 13,96	17,07 ± 3,19	20,79 ± 10,50
30	1114,90 ± 658,63		21110 ± 1579	2188,3 ± 175,3		27,77 ± 6,12	36,57 ± 16,73
31	1092,05 ± 347,63		14066 ± 1940	2015,4 ± 143,7		23,58 ± 4,63	23,77 ± 7,44
32	1268,00 ± 561,86		43327 ± 1982	2116,9 ± 154,4		24,66 ± 5,37	
33	1407,25 ± 413,36	198,47 ± 102,20	15977 ± 3831	2588,0 ± 170,2		12,56 ± 3,73	22,49 ± 6,59
34	1165,60 ± 370,92		10544 ± 1422	2288,3 ± 157,5		15,35 ± 4,03	33,22 ± 7,10
35	1087,45 ± 379,30	307,38 ± 102,24	18606 ± 4648	2169,5 ± 151,4		33,06 ± 5,34	27,99 ± 7,19
36	1359,15 ± 401,25	337,12 ± 106,11	17584 ± 4185	2198,5 ± 156,0		16,90 ± 4,02	29,26 ± 6,33
37	929,03 ± 520,56		13468 ± 1647	2166,3 ± 159,1		26,12 ± 3,90	19,91 ± 16,02



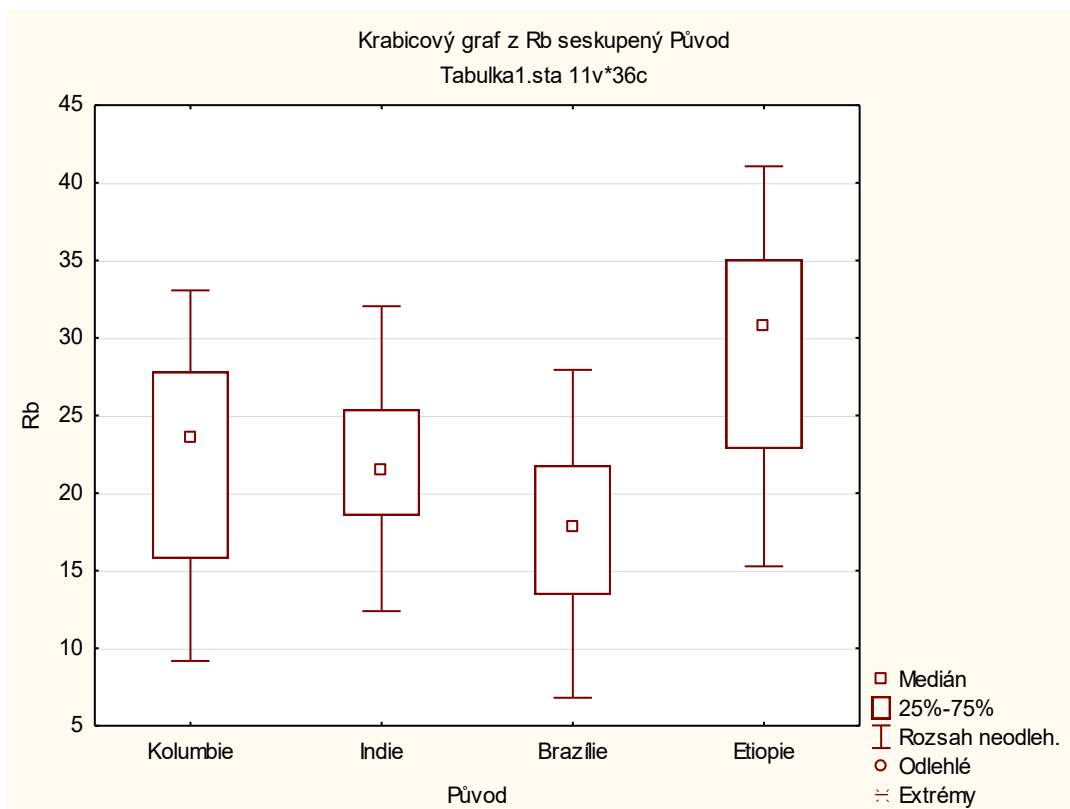
Příloha 2 Krabicový graf závislosti koncentrace vápníku (mg.kg^{-1}) na zemi původu



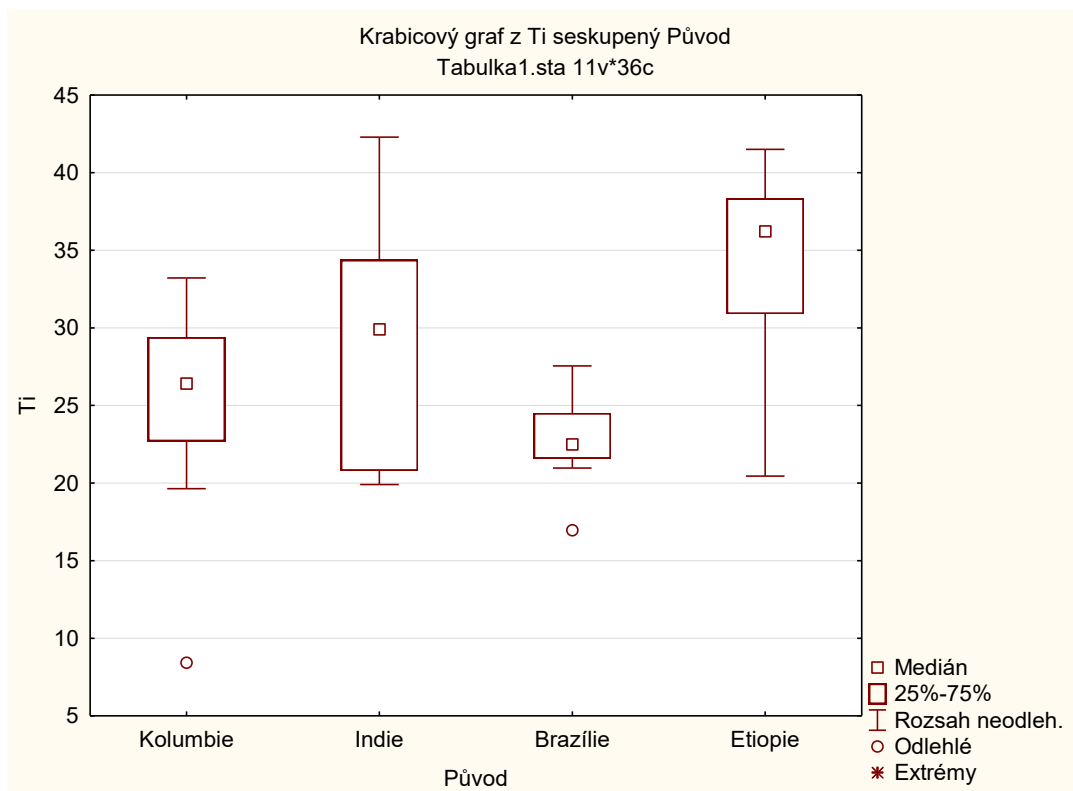
Příloha 3 Krabicový graf závislosti koncentrace draslíku (mg.kg^{-1}) na zemi původu



Příloha 4 Krabicový graf závislosti koncentrace hořčíku (mg.kg^{-1}) na zemi původu



Příloha 5 Krabicový graf závislosti koncentrace rubidia (mg.kg^{-1}) na zemi původu



Příloha 6 Krabicový graf závislosti koncentrace titanu (mg.kg^{-1}) na zemi původu

Příloha 7 Vyhodnocení analýzy rozptylu pro vápník s pravděpodobností 95 %

Jednorozm. výsledky pro každou záv. proměnnou (Tabulka1.sta) Sigma-omezená parametrizace Dekompozice efektivní hypotézy					
Efekt	Stupně volnosti	Ca SČ	Ca PČ	Ca F	Ca p
Abs. člen	1	37725013	37725013	844,6543	0,000000
Původ	3	336659	112220	2,5126	0,079724
Chyba	27	1205908	44663		
Celkem	30	1542567			

Příloha 8 Vyhodnocení analýzy rozptylu pro draslík s pravděpodobností 95 %

Jednorozm. výsledky pro každou záv. proměnnou (Tabulka1.sta) Sigma-omezená parametrizace Dekompozice efektivní hypotézy					
Efekt	Stupně volnosti	K SČ	K PČ	K F	K p
Abs. člen	1	1,111030E+10	1,111030E+10	302,1708	0,000000
Původ	3	3,146344E+08	1,048781E+08	2,8524	0,052685
Chyba	32	1,176585E+09	3,676828E+07		
Celkem	35	1,491219E+09			

Příloha 9 Vyhodnocení analýzy rozptylu pro hořčík s pravděpodobností 95 %

Jednorozm. výsledky pro každou záv. proměnnou (Tabulka 1.sta) Sigma-omezená parametrizace Dekompozice efektivní hypotézy					
Efekt	Stupně volnosti	Mg SČ	Mg PČ	Mg F	Mg p
Abs. člen	1	141713021	141713021	6785,287	0,000000
Původ	3	257163	85721	4,104	0,015603
Chyba	28	584790	20885		
Celkem	31	841952			

Příloha 10 Vyhodnocení analýzy rozptylu pro rubidium s pravděpodobností 95 %

Jednorozm. výsledky pro každou záv. proměnnou (Tabulka 1.sta) Sigma-omezená parametrizace Dekompozice efektivní hypotézy					
Efekt	Stupně volnosti	Rb SČ	Rb PČ	Rb F	Rb p
Abs. člen	1	18295,46	18295,46	323,4718	0,000000
Původ	3	592,21	197,40	3,4902	0,026810
Chyba	32	1809,91	56,56		
Celkem	35	2402,12			

Příloha 11 Vyhodnocení analýzy rozptylu pro titan s pravděpodobností 95 %

Jednorozm. výsledky pro každou záv. proměnnou (Tabulka 1.sta) Sigma-omezená parametrizace Dekompozice efektivní hypotézy					
Efekt	Stupně volnosti	Ti SČ	Ti PČ	Ti F	Ti p
Abs. člen	1	21182,82	21182,82	616,1558	0,000000
Původ	3	379,31	126,44	3,6778	0,026052
Chyba	24	825,10	34,38		
Celkem	27	1204,41			