

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ
ÚSTAV CHEMIE POTRAVIN A BIOTECHNOLOGIÍ

FACULTY OF CHEMISTRY
INSTITUTE OF FOOD SCIENCE AND BIOTECHNOLOGY

ALERGENNÍ VONNÉ LÁTKY V POTRAVINÁCH A PŘEDMĚTECH
BĚŽNÉHO UŽÍVÁNÍ

DIZERTAČNÍ PRÁCE
DOCTORAL THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

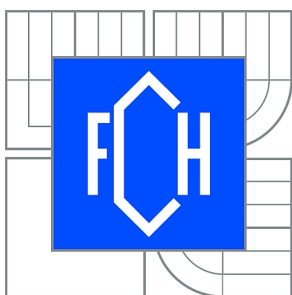
Ing. RADKA DIVIŠOVÁ

BRNO 2014



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA CHEMICKÁ

ÚSTAV CHEMIE POTRAVIN A BIOTECHNOLOGIÍ

FACULTY OF CHEMISTRY

INSTITUTE OF FOOD SCIENCE AND BIOTECHNOLOGY

ALERGENNÍ VONNÉ LÁTKY V POTRAVINÁCH A PŘEDMĚTECH BĚŽNÉHO UŽÍVÁNÍ

FRAGRANCE ALLERGENS IN FOODS AND EVERYDAY USE PRODUCTS

DIZERTAČNÍ PRÁCE

DOCTORAL THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Ing. RADKA DIVIŠOVÁ

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. JIŘINA OMELKOVÁ, CSc.

BRNO 2014



Vysoké učení technické v Brně
Fakulta chemická
Purkyňova 464/118, 61200 Brno 12

Zadání dizertační práce

Číslo dizertační práce:	FCH-DIZ0086/2013	Akademický rok: 2013/2014
Ústav:	Ústav chemie potravin a biotechnologií	
Student(ka):	Ing. Radka Divišová	
Studijní program:	Chemie a technologie potravin (P2901)	
Studijní obor:	Potravinářská chemie (2901V021)	
Vedoucí práce	doc. Ing. Jiřina Omelková, CSc.	
Konzultanti:	Ing. Eva Vítová, Ph.D.	

Název dizertační práce:

Alergenní vonné látky v potravinách a předmětech běžného užívání

Zadání dizertační práce:

Dílčí cíle práce:

1. na základě literární rešerše výběr analytické metody vhodné pro stanovení těkavých vonných látek
2. optimalizace experimentálních podmínek metody pro stanovení konkrétních vonných látek s alergenními účinky
3. validace vybrané metody (linearita, opakovatelnost, reprodukovatelnost, limity detekce a kvantifikace, robustnost, výtěžnost)
4. aplikace optimalizované a validované metody na širokou škálu reálných vzorků zahrnující aromatizované potraviny, kosmetické prostředky a hračky
5. vyhodnocení obsahu sledovaných látek ve vzorcích
 - srovnání s informacemi na obalu
 - srovnání s příslušnými legislativními požadavky
 - vyhodnocení možných negativních účinků na zdraví uživatelů
6. senzorické hodnocení (především chuti a/nebo vůně) vzorků pomocí profilových testů

Termín odevzdání dizertační práce: 31.3.2014

Dizertační práce se odevzdává v děkanem stanoveném počtu exemplářů na sekretariát ústavu a v elektronické formě vedoucímu dizertační práce. Toto zadání je přílohou dizertační práce.

Ing. Radka Divišová
Student(ka)

doc. Ing. Jiřina Omelková, CSc.
Vedoucí práce

doc. Ing. Jiřina Omelková, CSc.
Ředitel ústavu

V Brně, dne 20.7.2009

prof. Ing. Martin Weiter, Ph.D.
Děkan fakulty

ABSTRAKT

Vonné látky se přidávají do potravin, kosmetických a jiných produktů především pro vylepšení jejich sensorické kvality (chuti a/nebo vůně); nepříjemným vedlejším účinkem však může být výskyt širokého spektra různých nežádoucích biologických účinků. U některých vonných látek, široce využívaných v kosmetických produktech, bylo prokázáno, že způsobují např. kožní precitlivělost, vyrážky, dermatitidu, bolest hlavy, kašel aj. Pro ochranu zdraví spotřebitelů schválila Evropská unie směrnici o kosmetických přípravcích (ES/1223/2009), která po producentech vyžaduje označení 26 alergenních látek na štítku finálního produktu při překročení stanovené koncentrační meze (0,01 % pro výrobky typu *rinse-off* a 0,001 % pro výrobky typu *leave-on*). Někteří výrobci však stále schovávají obsah alergenních látek do souhrnného názvu „*aroma*“ na etiketě a sledování obsahu těchto látek v kosmetických prostředcích je tedy velmi důležité. Vonné látky jsou přítomny nejen v kosmetických přípravcích, ale jsou jimi aromatizovány i různé druhy potravin. Na rozdíl od kosmetických přípravků nemusí výrobci potravin přítomné alergenní vonné látky na obalech uvádět, proto je sledování obsahu těchto látek vysoce žádoucí vzhledem k možnému zdravotnímu riziku, které představují.

Cílem této práce bylo vyvinout metodu pro simultánní stanovení regulovaných vonných alergenů v potravinách a předmětech běžného užívání. Na základě provedené literární rešerše byla zvolena metoda založená na extrakci analytů pomocí headspace mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií s FID detekcí (HS-SPME-GC-FID). Z testovaných SPME vláken prokazovalo nejvyšší extrakční účinnost vlákno CAR/PDMS. Pro optimalizaci hlavních extrakčních parametrů ovlivňujících mikroextrakční proces byly použity techniky jednorozměrné a vícerozměrné analýzy dat. Finální validace metody byla provedena z hlediska linearity, opakovatelnosti, reprodukovatelnosti, výtěžnosti, limitů detekce a kvantifikace.

Optimalizovaná a validovaná metoda byla aplikována na širokou škálu produktů zahrnující kosmetické přípravky, aromatizované potraviny a hračky. Výrobky byly zároveň podrobeny sensorickému hodnocení především z hlediska chuti a/nebo vůně (tzv. *flavouru*), které mohou mít spojitost s obsahem sledovaných vonných látek. Pro hodnocení byl použit profilový test (ČSN EN ISO 13299) a hodnocení podle sedmibodové kategorové ordinální stupnice (ČSN ISO 4121).

KLÍČOVÁ SLOVA

alergenní vonné látky, kosmetika, mikroextrakce tuhou fází, plynová chromatografie, sensorická analýza

ABSTRACT

Fragrances are added to food, cosmetics and other products primarily for enhancement of their sensory quality (taste and/or aroma). However, the usage of these compounds is associated with the wide range of various adverse biological effects. Some fragrances widely used in cosmetics are proved to cause e.g. skin sensitization, rashes, dermatitis, headache, cough etc. To protect the health of consumers, European union approved the cosmetic directive (ES/1223/2009) that requires the labeling of 26 allergen fragrances on the final product label if concentration exceeds the given level (0,01 % for *rinse-off* and 0,001 % for *leave-on* product). However, some producers hide the presence of allergens in the final product under the general term „aroma“. For this reason it is very important to monitor the content of these substances in cosmetic products. Fragrances are found not only in cosmetics, but the various types of food are also aromatized by them. Unlike cosmetics, the food producers are not obliged to label the presence of fragrance allergens on the packaging. Therefore, the monitoring of these fragrances is highly desirable because of the potential health risks they pose.

The aim of this study was to develop a method for simultaneous determination of regulated fragrance allergens in food and everyday use products. The method based on extraction of analytes by solid phase microextraction coupled to gas chromatography with FID detection (HS-SPME-GC-FID) was chosen on the basis of the literature review. The fiber CAR/PDMS provided the highest extraction efficiency among the SPME fibers tested. Univariate and multivariate data analysis were used to optimize the main parameters affecting microextraction process. The final method validation was performed in terms of linearity, repeatability, reproducibility, recovery, limits of detection and quantification.

The optimized and validated method was applied to a wide range of products including cosmetics, aromatized food and fragranced toys. These products were also subjected to sensory evaluation especially in terms of taste and/or aroma (i.e. flavour), which may be associated with the content of the monitored fragrances. The profile test (EN ISO 13299) and seven-point category ordinal scale (ISO 4121) were used for sensory evaluation.

KEY WORDS

fragrance allergens, cosmetics, solid-phase microextraction, gas chromatography, sensory analysis

DIVIŠOVÁ, Radka. *Alergení vonné látky v potravinách a předmětech běžného užívání*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2014. 224 s. Vedoucí dizertační práce doc. Ing. Jiřina Omelková, CSc..

PROHLÁŠENÍ

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

.....
podpis studenta

Poděkování

Ráda bych na tomto místě poděkovala všem lidem, kteří svými radami a připomínkami přispěli k vypracování této dizertační práce. Děkuji Ing. Evě Vítové, Ph.D. za její rady a čas, který mi věnovala, svému manželovi a také svým rodičům za jejich podporu a důvěru.

OBSAH

1	Úvod	8
2	Současný stav řešené problematiky	10
2.1	Vonné látky	10
2.1.1	Přírodní vonné látky	10
2.1.2	Syntetické vonné látky	11
2.2	Vliv vonných látek na zdraví člověka	13
2.2.1	Symptomy reakcí na vonné látky	14
2.3	Regulační aspekty vonných ingrediencí	16
2.3.1	Samoregulace parfumérského průmyslu	17
2.3.2	Evropské směrnice	19
2.4	Legislativa vonných látek v oblasti hraček	21
2.4.1	Vyhláška č. 86/2011 Sb.	21
2.5	Legislativa vonných látek v oblasti potravin	21
2.5.1	Ostatní předpisy pro vonné látky v potravinách	22
2.6	Analytické metody vhodné pro stanovení vonných látek	23
2.7	Extrakce vonných látek z matrice vzorku	23
2.7.1	Extrakce tuhou fází – SPE	24
2.7.2	Extrakce tuhé látky kapalinou	25
2.7.3	Extrakce kapalinou	26
2.7.4	Extrakce plynem - headspace analýza	27
2.7.5	Mikroextrakce tuhou fází – SPME	28
2.7.6	Sorpční extrakce míchadlem – SBSE	29
2.8	Instrumentální metody pro stanovení vonných látek	30
2.8.1	Multidimenzionální plynová chromatografie (MDGC)	30
2.8.2	GC-Olfaktometrie – GC-O	31
2.8.3	Ostatní instrumentální metody	31
2.9	Aplikace extrakčních a instrumentálních metod v kosmetologii	31
2.10	Aplikace extrakčních a instrumentálních metod v potravinářství	35
2.11	Senzorické hodnocení chuti a/nebo vůně (flavouru)	37
3	Cíle dizertační práce	40
4	Experimentální část	41
4.1	Laboratorní vybavení	41
4.1.1	Chemikálie	41
4.1.2	Přístroje a pomůcky	41
4.2	Seznam vzorků použitých k analýze	42
4.3	Stanovení alergenních vonných látek metodou SPME-GC-FID	47
4.3.1	Postup při vzorkování a desorpci analytů	47
4.3.2	Identifikace standardů alergenních vonných látek	47
4.3.3	Optimalizace extrakčních podmínek	48
4.3.4	Optimální podmínky SPME-GC-FID analýzy	48
4.3.5	Stanovení opakovatelnosti a reprodukovatelnosti metody	48
4.3.6	Stanovení linearity metody	49
4.3.7	Stanovení mezí detekce a mezí stanovitelnosti	49
4.3.8	Stanovení výtěžnosti	49

4.3.9	Příprava reálného vzorku	50
4.4	Senzorické hodnocení reálných vzorků	50
4.4.1	Potraviny	50
4.4.2	Kosmetické přípravky	51
4.5	Statistické zpracování výsledků	51
5	Výsledky a diskuze	52
5.1	Identifikace alergenních vonných látek	52
5.2	Optimalizace extrakčních podmínek.....	53
5.2.1	Výběr vhodného typu SPME vlákna.....	54
5.2.2	Doba dosažení rovnováhy pro jednotlivé standardní látky	56
5.2.3	Doba extrakce pro jednotlivé standardní látky.....	57
5.2.4	Teplota extrakce pro jednotlivé standardní látky	58
5.2.5	Desorpční podmínky pro jednotlivé standardní látky	59
5.2.6	Multivariační optimalizace SPME metody	61
5.2.7	Konečné extrakční podmínky HS-SPME-GC-FID metody.....	66
5.3	Optimalizace podmínek GC-FID analýzy	67
5.4	Validace metody HS-SPME-GC-FID.....	67
5.5	Monitoring vonných alergenů v reálných vzorcích	71
5.5.1	Kosmetické přípravky	71
5.5.2	Potraviny	92
5.5.3	Dětské hračky	114
5.6	Senzorické hodnocení reálných vzorků	116
5.6.1	Kosmetické přípravky	117
5.6.2	Potraviny	129
5.7	Vliv alergenních vonných látek na sensorické vlastnosti produktů.....	156
6	Závěr.....	158
7	Seznam použitých zdrojů.....	162
8	Seznam použitých symbolů a zkratk	177
9	Seznam příloh	180
10	Přílohy	181
10.1	Příloha A: Vlastnosti alergenních vonných látek.....	181
10.2	Příloha B: Chromatogram směsi standardů alergenních vonných látek	205
10.3	Příloha C: Vybrané chromatogramy reálných vzorků.....	206
10.4	Příloha D: Dotazník pro sensorické hodnocení zubních past	210
10.5	Příloha E: Dotazník pro sensorické hodnocení kosmetických výrobků	212
10.6	Příloha F: Dotazník pro sensorické hodnocení sypaných čajových směsí.....	214
10.7	Příloha G: Dotazník pro sensorické hodnocení porcovaných čajových směsí a žvýkacích gum	216
10.8	Příloha H: Dotazník pro sensorické hodnocení želatinových bonbónů a ovocných aromatizovaných alkoholických a nealkoholických nápojů.....	219
10.9	Životopis autora.....	221

1 ÚVOD

Problematika alergenů je v současné době velmi aktuální, počet osob alergických na různé podněty je velmi vysoký a stále se zvyšuje. Látek, které mohou vyvolávat negativní účinky (tzv. alergenů, a to prokázaných i potenciálních), existuje celé spektrum, co se týče např. složení, výskytu a mechanismu působení. V poměrně nedávné době bylo prokázáno, že i některé vonné látky mohou mít negativní účinek na senzitivní jedince dokonce už ve velice nízkých koncentracích.

Vonné látky se nacházejí v široké škále pravidelně užívaných produktů zahrnujících parfémů, prací prostředky, přípravky pro intimní hygienu, mýdla, vlasové přípravky, deodoranty, tělové krémy, zubní pasty, aj. Tyto kosmetické přípravky se v současnosti staly masovou záležitostí a není člověka, který by alespoň jeden výrobek kosmetického průmyslu denně nepoužíval. Kromě užitku však tyto přípravky mohou náš život i nečekaně znepríjemnit. Prvním ukazatelem iritace je obvykle kožní vyrážka, ale nežádoucí reakce mohou mít i jinou formu, např. nevolnost, závrať, bolest hlavy, svědčící pokožku, oční a nosní sliznice, dušnost, kašel, bolest v krku, neobvyklou chuť v ústech aj.

Vědecké a lékařské komunity se začaly těmito problémy zabývat a výsledkem bylo vydání nařízení v rámci evropské kosmetické direktivy, který taxativně určuje 26 nejvýznamnějších alergizujících vonných látek. Na základě této direktivy jsou výrobci povinni deklarovat přítomnost těchto alergenních substancí na štítku produktu, jestliže je překročena hranice 0,01 % pro výrobky typu *rinse-off*¹ a 0,001 % pro výrobky typu *leave-on*². Ostatní chemikálie, které není třeba jednotlivě uvádět, jsou seskupeny pod názvem „*parfum*“ či „*aroma*“.

Dnes si člověk už může vybrat, jestli zvolí čistě přírodní kosmetiku nebo bude důvěřovat přípravkům, jež vytvořili vědci ve svých laboratořích. Asi 10 % alergiků nesnáší syntetické parfémů, ale obrát k přírodě nemusí být vždy dobrou alternativou, protože až 90 % přírodních surovin také obsahuje nejméně jeden z 26 sledovaných alergenů ve vyšší koncentraci.

Vzhledem k všudypřítomnosti vonných látek, nejen v kosmetických přípravcích, ale i v ostatních předmětech běžného užívání, je prakticky nemožné se jim vyhnout. Vonné látky jsou také obsaženy v mnoha potravinách, buď jako jejich přirozená součást, nebo jsou do potravin cíleně přidávány (aromatizace potravin). V současné době trh s potravinami požaduje rozmanitost, chutné a speciální výrobky, které by upoutaly spotřebitele. Sortiment aromatizovaných potravinářských výrobků se neustále rozšiřuje (čaje, žvýkačky, likéry, aj.), avšak o vonných látkách v nich obsažených je zpracováno velmi málo dostupných informací. Je prakticky jisté, že se mezi nimi nacházejí i mnohé zmíněné alergenní substance. Přídavek těchto alergenních vonných látek do potravin, na rozdíl od kosmetických výrobků, není legislativně ošetřen.

Poptávka po atraktivních produktech vyznačujících se příjemnou vůní je spojena také s negativními alergickými projevy. Jejich legislativou dané omezení s sebou přináší nutnost nalezení jednoduché a rychlé metody pro jejich stanovení, která by umožňovala efektivní kontrolu především kosmetických výrobků. Tento fakt výrazně podnítil výzkum v oblasti vůní a kosmetiky, o čemž svědčí řada níže citovaných prací, publikovaných především

¹ kosmetické přípravky, které se po nanesení do 20 minut smývají

² kosmetické přípravky, které se z pokožky nesmývají

v posledních několika málo letech. Nelze vyloučit, že v budoucnu bude obsah těchto látek legislativně kontrolován i v potravinách. Metoda by proto měla být použitelná pro široké spektrum různých matric, jaké představují různé druhy potravin, kosmetických a jiných výrobků.

V rámci této disertační práce je vyvinuta jednoduchá metoda pro stanovení těchto vonných látek. Součástí práce je monitoring vybraných sloučenin ve vzorcích aromatizovaných potravin, parfémovaných dětských hraček a předmětů běžného užívání (materiály a předměty určené pro styk s potravinami, hračky, kosmetické prostředky a výrobky pro děti ve věku do 3 let).

2 SOUČASNÝ STAV ŘEŠENÉ PROBLEMATIKY

2.1 Vonné látky

Vonné látky jsou poměrně silně vonící organické sloučeniny s charakteristickými, obvykle příjemnými vůněmi. Ze sensorického hlediska je lze definovat jako látky, které působí na čichové receptory a vyvolávají tak dojem vůně. Mohou současně působit i na chuťové receptory a jsou potom zároveň látkami chuťovými. I když tyto látky nejsou pro člověka nezbytně nutné, jsou mu prospěšné, a to zejména svým příznivým působením na jeho psychiku, mohou mít stimulační nebo sedativní účinky. Vůně mají schopnost měnit náladu nebo mohou působit jako určitý druh individuální asociace, kdy si člověk s určitou vůní vybaví konkrétní situaci, kterou prožil. Všeobecně působí harmonicky a obnovují v člověku rovnováhu. Jsou využívány v parfémtech, parfémovaných produktech a potravinářství.

Parfémové kompozice a chuťová aromata jsou vyráběny z kvalitních přírodních materiálů (silic, destilátů, extraktů) a dále z tzv. přírodně identických látek, tj. látek běžně se vyskytujících v přírodě, které jsou však převážně z ekonomických důvodů vyráběny synteticky. Vedle toho se pak používají i látky, které se v přírodě nevyskytují (a to i do chuťových aromat) a jsou vyrobeny synteticky [1].

2.1.1 Přírodní vonné látky

Všechny vonné látky v přírodě produkují živé organismy, především rostliny. Rostliny mají schopnost syntetizovat, akumulovat a emitovat těkavé látky, které mohou sloužit jako vonné a chuťové molekuly v důsledku interakce s lidskými receptory [2].

Přírodní vonné látky, také označované jako esenciální oleje, jsou získávány z různých částí rostlin, jako jsou květy (jasmín, růže, gardénie), plody (citron, pomeranč, vanilka), kořeny (andělíka), listy (fialka, pačuli, máta), dřevo (santálové dřevo, cedrové dřevo), kůra (skořice, muškát), pryskyřice (vonodřev, galbanum) a semena (andělíka, celer, anýz) nebo z celých rostlin (levandule, pelargónie). Také mohou být získávány z živočišných žláz a orgánů, jako například pižmo, které je získáváno z varlat kabara; cibet, což je sekrece ze žláz cibetky; šedá ambra pravá, která je získávána ze střevní sekrece vorvaně; anebo kastoreum, které je získáváno ze žláz blízko reprodukčních orgánů bobra [3].

Rostliny využívané jako koření a ochucovadla jsou obvykle aromatické a pronikavé vzhledem k přítomnosti různých typů esenciálních olejů. Přírodní vůně obsahuje několik set různých chemikálií, několik málo hlavních a mnoho vedlejších, které jsou odpovědné za komplexnost vůně. Je možné izolovat tisíce vonných látek ze všech částí rostlin, přičemž mezi nejdůležitější suroviny využívané pro získání přírodních vonných látek a aromat patří esenciální oleje, konkrétní silice, resinoidy, olejopryskyřice a výluhy [2, 4].

Esenciální oleje jsou těkavé, velmi komplexní směsi, které mohou obsahovat 20-60 komponent v různých koncentracích. Tyto přírodní směsi jsou čiré, zřídka zbarvené kapaliny rozpustné v tučných a organických rozpouštědlech a jsou získávány z různých částí aromatických rostlin. Mohou obsahovat od několika desítek do několika set složek, zejména uhlovodíky (terpeny a sesquiterpeny), kyslíkaté sloučeniny (alkoholy, aldehydy, ketony, kyseliny, fenoly, oxidy laktony, ethery a estery). Jsou většinou charakterizovány dvěma nebo třemi hlavními komponentami v poměrně vysokých koncentracích (20-70 %_{w/w}), např. linalool (68 %_{w/w}) v koriandrovém esenciálním oleji, v porovnání s jinými komponentami,

kteřé jsou přítomny ve stopových množstvích. V současné době je známo asi 3000 esenciálních olejů, z nichž je přibližně 300 komerčně důležitých zejména pro farmaceutický, agronomický, potravinářský a kosmetický průmysl. Esenciální oleje jsou využívány pro jejich baktericidní, fungicidní, antiparazitální, insekticidní nebo léčivé vlastnosti a samozřejmě pro jejich vůni. Esenciální oleje nebo některá z jejich komponent jsou využívány v parfémtech, v sanitárních výrobcích, v zubním lékařství, jako potravinářské konzervanty a další [2, 4, 5].

Silice konkrétní neboli konkrét je voskovitá, polotuhá hmota obsahující vedle vonných látek také tuky a vosky. Ty se odstraní rozmícháním konkréту za tepla v ethanolu, po rozpuštění se lihový roztok vymrazí, přefiltruje a ethanol se odpaří. Získá se **absolutní silice** [4, 6, 7].

Resinoidy jsou polotuhé, pastovité hmoty, zbarvené podle výchozí suroviny. Vyznačují se příjemnými balzamickými vůněmi a používají se ke stabilizaci parfémových kompozic. Resinoidy jsou produkty získávané extrakcí přírodních surovin, nejčastěji pryskyřic, klejopryskyřic a balzámů. Pryskyřice jsou pevné produkty různých keřů a stromů, hlavně jehličnatých. Obsahují silice, pryskyřičné kyseliny, pryskyřičné alkoholy a estery. Mezi pryskyřice se řadí např. mastix získávaná ze stromů pistácie. Klejopryskyřice jsou vylučovány některými rostlinami a obsahují silice, pryskyřice a kleje, které ve vodě tvoří gel (např. myrha). Balzámy jsou velmi viskózní nebo polotuhé, zbarvené a aromatické rostlinné produkty rozpustné v alkoholu, ale nerozpustné ve vodě. Jsou získávány z exsudátu stromů, často uměle produkovaného nařiznutím kůry. K nejběžnějším balzámům s charakteristickou vůní patří např. peruánský balzám, toluánský balzám, ambroň, galbanum, myrha a benzoin [4, 6, 7].

Olejopryskyřice neboli oleoresiny jsou extrakty získané z koření nebo zeleniny. Olejopryskyřice se používají jako suroviny pro výrobu potravinářských aromat nebo místo přírodního koření k ochucování potravin. Většina olejopryskyřic obsahuje jako hlavní složky silice podobně jako extrakty z koření, ale přítomny jsou i další složky. Některé olejopryskyřice obsahují barviva příslušného koření nebo zeleniny nebo pálivé látky [7].

Dalším materiálem k výrobě aromat a parfémů jsou **výluhy**. Materiálem pro výluhy bývají drogy (sušené nebo jinak k extrakci připravené přírodní suroviny), ovoce, zelenina, výlisky a další. Vznikají extrakcí výchozího materiálu jemným rafinovaným lihem nebo jinými těkavými organickými rozpouštědly. Lihový, popř. vodný výluh z jednoho druhu drogy se nazývá tinktura. Extrakci lze provádět za normální teploty stáním s rozpouštědlem (maceráty) nebo průtokem rozpouštědla přes drogu (perkoláty) [6, 7].

Konkréty nebo **absolutna** jsou získávány extrakcí rostlinného materiálu rozpouštědlem (pro absolutna je ethanol), s následným odpařováním rozpouštědla. Materiály vyrobené tímto způsobem podléhají menším změnám během jejich přípravy než ty, které jsou destilovány [6, 7].

2.1.2 Syntetické vonné látky

Zatímco dříve byly zdrojem vonných a chuťových látek výhradně přírodní materiály, dnes je rozvoj této oblasti nemyslitelný bez látek vyrobených synteticky. Při aplikacích jde vždy o pestré směsi často několika desítek látek, a to ryze přírodního, ryze syntetického nebo kombinovaného původu. Velmi často je požadavek přírodního původu, který je běžný především u chuťových komplexů, pouze komerční záležitostí, neboť kvalita resp. čistota syntetických složek je mnohdy vyšší než složek přírodních. Jisté ovšem je, že bez syntetických látek se moderní průmysl látek vonných a chuťových neobejde. V našich

zeměpisných šířkách je tento fakt podtržen ještě tím, že klimatické podmínky nejsou příliš vhodné pro zajišťování kvalitních přírodních surovinových zdrojů v potřebném množství [1].

Hlavní výhoda syntetických ingrediencí je, že snižují ceny parfémů ve srovnání s přírodními vůněmi. Také mohou být získávány vždy bez problémů souvisejících s neúrodou nebo nedostatkem zásob. Další výhodou je fakt, že mohou být syntetizovány nové chemikálie, a tudíž jsou vyvíjeny nové vůně, které se v přírodě nevyskytují [3].

Naopak určitou nevýhodou syntetických ingrediencí je, že není možné přírodní parfém zcela napodobit. Může být tvořen stovkami až tisíci vonných látek, které mají synergický účinek, což je obtížné synteticky napodobit, a tak výsledný syntetický parfém může mít nepatrně odlišnou vůni [3].

Počet a sortiment syntetických vonných látek roste a zdokonalováním technologických postupů se zlepšuje i jejich kvalita. Hlavními surovinami pro výrobu syntetických vonných látek jsou především produkty ropného průmyslu a suroviny získávané při chemickém zpracování uhlí. Důležité místo však stále mají některé přírodní materiály, vyráběné ve velkých množstvích, jako je například terpentýn nebo některé tuky [8].

Mnoho vonných látek, spotřebovávaných ve velkých množstvích, je vyráběno z toluenu, fenolů a styrenu, případně jejich derivátů. Monoterpenické látky se syntetizují z isoprenu a pinenů. Četné vonné látky lze vyrobit také z ricinového oleje a mastných kyselin, získávaných z rostlinných i živočišných tuků [8].

Syntetické vonné a chuťové látky lze nalézt téměř ve všech hlavních skupinách organických sloučenin, ať jsou to uhlovodíky, halogenderiváty, alkoholy a fenoly, thiooly, ethery, sulfidy, dusíkaté deriváty, aldehydy, ketony, karboxylové kyseliny a jejich deriváty – především estery a laktony, heterocyklické sloučeniny a další [1].

Vonné látky mohou být klasifikovány do různých skupin podle jejich chemické struktury. Většina z nich je složena z terpenů, ostatní jsou tvořeny aromatickými a alifatickými složkami: monoterpenové uhlovodíky (limonen), seskviterpenové uhlovodíky (α -farnesen), alkoholy (cis-3-hexenol), monoterpenové alkoholy (linalool), seskviterpenové alkoholy (farnesol), fenoly (eugenol), aldehydy (2,6-nonadienal), terpenové aldehydy (citral), ketony (cyklohexanon), terpenové ketony (β -ionon), laktony (γ -undekalakton), estery (methylsalicylát), terpenové estery (linalyl acetát) a oxidy (eukalyptol) a další [3, 5, 9].

Následující typy sloučenin jsou nejčastěji využívány jako vonné chemikálie [9]:

- | | |
|---------------|---|
| (1) alkoholy: | <i>geraniol, citronellol, menthol, farnesol, linalool</i> |
| (2) aldehydy: | <i>lyral, liliál, 2,6-nonadienal, citral</i> |
| (3) ketony: | <i>β-ionon, muskon, acetylcedren</i> |
| (4) estery: | <i>benzylacetát, methyljasmonát, linalylacetát</i> |
| (5) laktony: | <i>jasmín lakton, ethylenbrasylát</i> |
| (6) ethery: | <i>ambroxan, galaxolid</i> |

Přírodní vonné chemikálie byly používány po tisíce let a jsou používány dodnes. Za posledních 50 let se však částečně na úkor přírodních složek rozvinul průmysl aromat a vonných látek využívající syntetické produkty. Dnes je kolem 90 % z nově zavedených vonných ingrediencí syntetického původu, přesto poptávka po přírodních látkách rychle roste, jak ze strany spotřebitelů, kteří žádají návrat k přírodě, tak parfumérů a flavouristů, kteří hledají nové neobvyklé ingredience. Proto se procento přírodních aromat s ohledem na všechny přidané „flavoury“ zvýšilo na 90 % (EU) a 80 % (USA) v nápojích, na 80 % (EU,

USA) v ochucených potravinách (cukrovinky, slané a sladké pečivo apod.) a na 50 % (EU) a 75 % (USA) v mléčných výrobcích [2].

2.2 Vliv vonných látek na zdraví člověka

Alergie na parfémy a vonné produkty je poměrně častá, se vzrůstající tendencí vzhledem k neustálému nárůstu používání těchto produktů. I když mohou být parfémové komponenty alergenními samy o sobě, mohou také obsahovat senzibilizující kontaminanty a vysoce alergenní oxidační produkty [10].

Vonné složky jsou u testovaných pacientů druhou nejčastější příčinou kontaktní alergie hned po solích niklu. Kosmetické přípravky jsou příčinou kontaktního ekzému asi u 10 % vyšetřovaných pacientů. Senzibilizace na směs vonných komponent se postupně zvyšuje zvláště u žen, neboť používají kosmetické přípravky častěji než muži [11].

S parfémovanými výrobky je každý z nás v každodenním kontaktu, je proto nemožné se jim vyhnout. Ani zavedení tzv. „*fragrance-free*“ přípravků neznamena, že přípravek neobsahuje vonné složky. Ty mohou být skryty buď ve formě konzervačního přípravku, maskovaného parfému nebo použitím rostlinných extraktů. Funkci skrytých vůní může zastávat např. benzaldehyd, benzylalkohol, citrusový olej nebo esenciální oleje [11, 12].

Ani termín „dermatologicky testováno“ není záruka, že produkt nezpůsobí zpětnou reakci. Toto tvrzení znamená pouze to, že lékař určil obecnou pravděpodobnost produktu nevyvolat zpětnou reakci. Neznamena to, že je produkt bezpečný pro každého. I když někteří výrobci mohou své produkty propagovat jako „*allergy free*“, lze konstatovat, že neexistuje žádný nealergizující kosmetický přípravek. Všechny kosmetické přípravky mají potenciál způsobovat alergické reakce. Proto se po výrobcích požaduje, aby zapsali použité suroviny do seznamu ingrediencí na obal kosmetického výrobku. Tyto ingredience musí být uvedeny v sestupném pořadí od nejvyšší koncentrace (obvykle voda) po nejnižší [4, 11, 13].

Přecitlivělost nastává při opakovaném používání výrobku na kůži a může vzniknout různým způsobem [14]:

- přímým kontaktem – např. ekzém očních víček po nanesení maskary,
- reakcí na výrobek nanesený v určité vzdálenosti – např. ekzém očních víček na základě použití kosmetického výrobku na jiném místě obličeji než na očích,
- po dotyku rukou – je-li výrobek určen k používání na jiné části těla a nechtěně aplikován na obličej nebo krk,
- kontaktem se vzduchem – alergen je přenášen vzduchem a dostane se do kontaktu s kůží (např. rozprašování WC deodorantů),
- kontakt s jinou osobou – reakce na výrobek nošený jinou osobou,
- při vystavení se slunečnímu záření - v přítomnosti slunečního záření se molekuly stávají fotoalergenem.

Parfemace je velmi častá a množství látek vyvolávajících senzibilizaci je vzhledem k typu pokožky v různých zemích rozdílné. Používá se více než 3000 různých chemických látek a míra expozice je rozsáhlá. Spektrum kontaktních alergenů se mění v průběhu let v souvislosti se změnami technologie výroby, způsobem života resp. chemizací našeho života. Od roku 1977 se rutinně používá k odhalování kontaktní alergie na vonné látky směs osmi vonných substancí (*fragrance mix I*), která je zařazena do Evropské standardní sady a testuje se v 8% koncentraci. Tato sada *fragrance mix I* obsahuje α -amylcinnamal, cinnamylalkohol, eugenol, cinnamal, geraniol, hydroxycitronellal, isoeugenol a extrakt z dubového mechu.

Epikutánním testem s vonnou směsí I (*fragrance mix I*) lze odhalit senzibilizaci na parfémů až v 80 % [11, 15-17].

Z tisíců různých vonných složek, které se používají, je známo nejméně 100 jako kontaktní alergen. Proto je vhodné testovat při podezření na alergii kromě základní sady alergenů i alergeny další, popř. samotný přípravek. V současné době nabývají na významu další vonné látky, které jsou součástí směsi *fragrance mix II* obsahující citral, citronellol, kumarin, lyral, hexylcinnamal, farnesol [11, 15-17].

2.2.1 Symptomy reakcí na vonné látky

Vonné látky mohou vstupovat do těla inhalací, ingescí nebo absorpcí. První ukazatel iritace nebo alergie je obvykle kožní vyrážka, avšak reakcemi na vonné látky mohou také být i jiné formy, zahrnující [18]:

- nevolnost, závrať, bolest hlavy;
- svědění pokožky, sliznice očí a nosu;
- dušnost (pískavý nebo pronikavý hlas při zúžení nebo ucpání vzdušnic);
- kašel, bolest v krku, neobvyklá chuť v ústech.

2.2.1.1 Alergické projevy na kůži

Faktory, které určují stupeň podráždění, zahrnují koncentraci látky, délku expozice na tuto chemikálii, zdravotní stav pokožky a lokace látky na těle. Ženy nesou větší riziko symptomů alergií, protože používají kosmetické přípravky ve větší míře než muži a protože jejich vyšší podíl tělního tuku zadržuje materiály déle. Děti a starší lidé pravděpodobně absorbují tyto materiály rychleji a ve větších koncentracích, protože je jejich pokožka tenčí než u většiny dospělých lidí [18].

Symptomy nejběžněji spojené s alergickými reakcemi na kosmetické přípravky jsou kožní vyrážky. Symptomy se pravděpodobně projeví během sedmi až deseti dnů po expozici a mohou se objevit kdekoli na těle. Alergické reakce na kosmetické přípravky obvykle zanechávají stopy na obličeji (rty, oči, uši) a krku. Symptomy s nimi související mohou zahrnovat [18, 19]:

- zčervenání, otok (angioedém);
- svědění (pruritus), symptom podobající se kopřivce;
- červenou nebo drsnou pokožku.

U některých pacientů s kosmetickou senzibilizací mohou být primárními lokalitami alergické reakce rty a ústa. V tomto případě jsou zvažovány ingredience rtěnek nebo balzámů na rty, potraviny obsahující aroma a přípravky dutiny ústní, kde některé ingredience (cinnamal) dodávají chuť a vůni. Projevem těchto senzibilizací může být erytém dásní [20].

Vonné iritace nebo alergie souvisejí s čtyřmi typy somatických reakcí [14]:

- 1) Kontaktní dermatitida – lokalizovaná vyrážka nebo iritace pokožky, která je vyvolána při kontaktu se substancí. Existují dva typy kontaktní dermatitidy:
 - a. Alergická kontaktní dermatitida – reakce imunitního systému na alergen.
 - b. Iritační kontaktní dermatitida – reakce při kontaktu se substancí, která dráždí pokožku.

- 2) Ekzém – zánětlivé kožní onemocnění s poškozenou pokožkou, která je obvykle suchá, šupinatá, zhrublá nebo také zarudnutá, mokvavá, s otokem a puchýři.
- 3) Vyrážka – červená, oteklá místa pokožky, která se vyskytují ve skupinách a mohou pálit, štípat nebo svědit. Jsou vyvolány alergickou reakcí způsobující prosakování krevní plazmy do pokožky.
- 4) Pigmentace – změna barvy kůže, která ztmavne. Může se vyskytnout i pigmentace nehtů způsobená aplikací různých kosmetických výrobků.

Iritální kontaktní dermatitida je také nejčastější nežádoucí reakcí na potraviny a je výsledkem přímého kontaktu s danou substancí bez požadavků na předchozí senzibilizaci. Oblasti s největší predispozicí k rozvoji této reakce jsou ruce a obličej. Oblast postižená reakcí je obecně ta, která byla v přímém kontaktu s alergenem. Mezi potraviny, které nejčastěji vyvolávají iritační kontaktní dermatitidu, se řadí koření, esenciální oleje z koření, citrusové ovoce, ananas, česnek, cibule, aj. [19, 21].

Alergickým projevem na kůži může také být alergická konjunktivitida – zánět tkáně lemující vnitro očního víčka. Konjunktivitida může být způsobena alergiemi, podrážděním nebo infekcí – všechny by mohly být potenciálně spojeny s užíváním kosmetického přípravku [20].

2.2.1.2 Projevy alergie v dýchací soustavě

Vonné látky mohou přivodit nebo zhoršit dýchací problémy. Expozice na kosmetické přípravky může také vyvolat astmatický záchvat nebo podobné symptomy následkem alergické reakce nebo proto, že kosmetické přípravky zhoršují izochronní astmatický stav. Symptomy související s astmatem mohou zahrnovat [18]:

- zrychlené dýchání, bolest nebo napjatost hrudníku;
- chronický kašel, krátkost dechu;
- horečka, bolest hlavy;
- neklid, nesoustředěnost, apatie.

Některé vonné materiály jsou známé tím, že mají potenciál způsobit dýchací senzibilizaci. Limonen je běžný terpen užívaný ve vůních a čisticích prostředcích. Když tato látka oxiduje, vytvářejí se substance, které mohou dráždit jak plíce, tak pokožku. Mnoho výrobců přidává antioxidanty, aby zabránili tvorbě potenciálně alergenních substancí.

Obavy, které se objevily během sedmdesátých let minulého století, se týkaly účinků aerosolů. Bylo zjištěno, že vlasové spreje vyvolávají dýchací symptomy u citlivého obyvatelstva. Tyto nepříznivé reakce byly přikládány obsaženým vonným látkám [18].

V krátké době mohou dráždivé látky způsobit zanícení dýchacích cest a zvýšit produkci hlenu. To může způsobit přecitlivělost na alergeny, jiné iritanty a patogeny. Je známo, že lidé s astmatem a jinými dýchacími potížemi jsou mnohem více ovlivněni iritanty. Nepřetržitá expozice dráždivým látkám zhoršuje tyto stavy dráždivými záchvaty a přispívá k základním zánětlivým procesům [18].

2.2.1.3 Projevy alergie v nervové soustavě

Vonné látky mohou mít vliv na mozek a nervový systém. Nejcitlivější vlákna trojklaného nervu jsou v nosní sliznici. Trojklaný nerv je pátý párový hlavový nerv, který sensitivně inervuje celý obličej, dutinu ústní, tvrdé a měkké patro, první dvě třetiny jazyka, všechny zuby, nosní a oční dutinu a část ušního boltce. Zajišťuje přenos všech vjemů z celé přední části hlavy, jak z povrchové oblasti obličeje, tak také z vnitřní části. Stimulace trojklaného nervu zodpovídá za chlad, teplo, brnění nebo dráždivé pocity. Materiály, které stimulují trojklaný nerv, mohou způsobit škubání v očích, podráždění nosní sliznice a dýchacích cest. Je velmi nepravděpodobné, že kterákoliv látka, které má přímý vliv na mozek a nervový systém, má pouze psychologické účinky. Během inhalační expozice na dvě formy limonenu a karvonu byly naměřeny autonomní parametry nervového systému: inhalace (+)-limonenu způsobila zvýšení systolického krevního tlaku a vyvolala čilost a nesoustředěnost; (-)-limonen způsobil zvýšení systolického krevního tlaku, ale žádné změny nálad; (-)-karvon způsobil zvýšení pulzu, diastolického krevního tlaku a nesoustředěnost; (+)-karvon způsobil zvýšení jak systolického, tak diastolického krevního tlaku. Uvádí se, že dlouhodobá inhalace těchto materiálů ovlivňuje oba parametry autonomního nervového systému a mentální a emocionální stavy. Rozdíly v odpovědi na proměnné formy stejných chemikálií ukazují, že chiralita látky je důležitým faktorem v biologických účincích materiálů [18].

Výzkum také podporuje tvrzení, že levandule obsahuje substance, které navozují uvolnění a klid. Pohyblivost myší, které inhalovaly linalool (sloučenina nalezena v levanduli) se snížila o 40 % [18].

2.2.1.4 Fotodermatózy

Interakce určitých chemických látek (fotosenzibilizátorů) v těle s ultrafialovým nebo viditelným světlem způsobují abnormální reakce kůže. Po absorpci fotonů s vlnovou délkou specifickou pro fotosenzibilizující substanci (tzv. akční spektrum) se na pokožce projevují fotosenzitivní reakce. Tyto reakce se podle mechanismu svého vzniku dělí na fototoxické a fotoalergické [19, 21].

Fototoxická reakce je neimunologická, přímo závislá na dávce, ve své podstatě abnormálně nadsazená reakce na sluneční expozici. Kůže reaguje erytémem, otokem a puchýři, přímým poškozením buněk prostřednictvím chemické substance (chromoforu) po aktivaci hlavně UVA zářením. Ke zvláštním a nejčastějším formám fototoxických obtíží patří kontakt s rostlinami a kosmetikou. Např. tzv. *Berloque-Dermatitis* jsou málo zánětlivé pruhovité hnědavé hyperpigmentace (nejvíce na krku) po nanesení parfému nebo kosmetiky s bergamotovým olejem jako důsledek následného vlivu slunečního záření, které mohou přetrvávat několik let. Fototoxická reakce je také spojena s potravinami, ovocem a zeleninou. Jednou z nejznámějších skupin jsou sloučeniny furanokumarinů, které se nacházejí v citrusových plodech, celeru nebo petrželi [21].

2.3 Regulační aspekty vonných ingrediencí

Vzhledem k zaměření této práce a pro lepší srozumitelnost je zde uveden přehled a definice předmětů běžného užívání, tak jak je definuje zákon č. 258/2000 Sb., o ochraně veřejného zdraví a o změně některých souvisejících zákonů, ve znění pozdějších předpisů.

Předmětem běžného užívání se rozumí [22]:

- 1) materiály a předměty určené pro styk s potravinami – materiály a předměty, u kterých je možné důvodně očekávat, že přijdou do styku s potravinami nebo že při jejich běžném použití dojde k přenosu jejich složek do potravin, materiály a předměty, které jsou ve styku s potravinami a jsou pro tento účel určeny, včetně aktivních a inteligentních materiálů a předmětů, které mají prodloužit životnost nebo zachovat či zlepšit stav balených potravin,
- 2) hračky – hračky, které jsou určeny k tomu, aby je děti vkládaly do úst, hračky, které mohou při předvídatelném způsobu užívání přicházet do styku s potravinami a pokrmů a hračky pro děti ve věku do 3 let, které mohou být při předvídatelném způsobu užívání s ohledem na duševní a fyzické schopnosti dítěte vkládány do úst,
- 3) kosmetické prostředky – látky nebo prostředky určené pro styk se zevními částmi lidského těla (pokožka, vlasový systém, nehty, rty, zevní pohlavní orgány), zuby a sliznicí dutiny ústní s cílem výlučně nebo převážně je čistit, parfémovat, měnit jejich vzhled, chránit je, udržovat je v dobrém stavu nebo korigovat lidské pachy, nejde-li o léčivo,
- 4) výrobky pro děti ve věku do 3 let – výrobky, které jsou takto výrobcem, dovozcem nebo osobou, která je uvádí na trh, označeny, nebo jsou k užívání dětmi ve věku do 3 let zjevně určeny, jde-li o ošacení, považuje se za výrobek pro děti ve věku do 3 let ošacení do velikosti 110 (včetně).

V následujících kapitolách jsou přehledně shrnuty legislativní požadavky na jednotlivé skupiny předmětů běžného užívání, především z hlediska obsahu vonných látek. Zvláštní kapitola je věnována legislativě v oblasti potravin.

Jak bylo popsáno v předchozích kapitolách, některé z vonných látek, široce používaných v přípravcích, prokázaly, že způsobují různé vedlejší účinky, jako kožní přecitlivělost, vyrážky, dermatitidu, kašel, astma, migrénu, atd. Proto legislativa Evropské unie ustanovila, že všechny komponenty kosmetických přípravků by měly být uvedeny na etiketě produktu. Restrikce je zavedena pro některé podezřelé vonné alergeny v dodatku III evropsko-unijní kosmetické direktivy, tj. pro substance, které mohou být zahrnuty až v maximální povolené koncentraci a pro substance, u kterých musí být jejich přítomnost uvedena v seznamu ingrediencí, pokud jejich koncentrace překročí 0,001 %_{w/w} v *leave-on* produktech a 0,01 %_{w/w} v *rinse-off* produktech. Potvrzené a podezřelé negativní účinky těchto látek na zdraví člověka mohou v budoucnu vést ke snížení těchto limitů a dokonce ke stanovení maximální povolené koncentrace pro mnohé z těchto látek. Ve skutečnosti byl již zpozorován pozitivní posun, a to začleněním termínu „*fragrance free*“ u některých kosmetických produktů. Tyto požadavky v sobě zahrnují nutnost nalezení postupů detekce a kvantifikace nízkých koncentrací těchto ingrediencí ve vysoce komplexních směsích. Tyto postupy musí být mnohoúčelové vzhledem k široké škále kosmetických produktů a k rozsahu koncentrací vonných alergenů [23].

2.3.1 Samoregulace parfumérského průmyslu

Mezinárodní parfumérský průmysl zavedl systém průmyslové samoregulace založené jak na dvou důležitých organizacích, RIFM a IFRA, které spolu velmi úzce spolupracují, tak na spolupráci mezi RIFM a FDA (*Food and Drug Administration*) [4, 15]. Cílem regulace je zajistit bezpečné používání látek, stanovit jejich kvalitativní a kvantitativní limity a zamezit potenciálně nebezpečným účinkům [24].

2.3.1.1 RIFM – The Research Institute of Fragrance Materials

Organizace RIFM byla založena v USA roku 1966, odkud přesídlila do New Jersey.

Cílem této nezávislé vědecké organizace je shromažďovat a systematicky studovat vonné látky běžně používané v parfumérském průmyslu, zapojit se do výzkumu a hodnocení vonných materiálů pomocí nezávislé skupiny expertů, distribuovat vědecké poznatky průmyslovým asociacím, podporovat uniformní bezpečnostní normy týkající se použití vonných přísad a zajistit tak jejich nezávadnost a maximální bezpečnost používání do spotřebitelských výrobků. Vonné látky jsou posuzovány z hlediska kvantity použití, expozice a chemické struktury [24-26].

Výsledky výzkumu RIFM jsou prověřovány a hodnoceny Panelem nezávislých expertů REXPAN, což je mezinárodní skupina dermatologů, patologů, toxikologů a ekologů, kteří se podílejí na stanovení bezpečnostních limitů látek. Tato skupina expertů také radí organizaci RIFM ohledně strategického postupu, kontroluje protokoly a vyhodnocuje všechny vědecké poznatky. Jejich konečná rozhodnutí jsou základem pro stanovení tzv. Standardů vydaných asociací IFRA, která je zařadí do kodexu (*Code of Practice*), kterému se musí všechny orgány podřídit [4, 24-27].

RIFM sestavila největší elektronickou databanku vonných a chuťových látek, která obsahuje více než 5000 materiálů [4].

2.3.1.2 IFRA – International Fragrance Association

Asociace IFRA byla založena v Ženevě v roce 1973.

Hlavní cíl této asociace je podporovat bezpečné používání vonných látek a z výsledků testů RIFM ustanovit závěry a doporučení ohledně používání vonných látek ve formě tzv. Standardů. Možné závěry kontrolovaných vonných materiálů jsou [4, 15, 24].

- bez omezení,
- s omezením,
- zakázáno.

IFRA vydává seznamy vonných látek a na základě probíhajících testů a jejich výsledků doporučuje koncentrace při použití v parfémových kompozicích. Doporučení jsou neustále doplňována – používání určité látky může být zpřísněno nebo naopak může být na základě nejnovějších testů doporučený limit zvýšen [28].

Standardy jsou předávány národním a regionálním asociacím, které o nich dále informují jednotlivé členské společnosti. Standardy jsou závazné pro všechny členy [15, 26]:

RIFM → REXPAN → IFRA → členové

Kodex vydaný asociací IFRA se vztahuje na výrobu a manipulaci všech vonných materiálů, na všechny typy aplikací a obsahuje kompletní sadu IFRA norem. Dodržování kodexu je podmínkou pro všechny dodavatelské firmy vonných látek, které jsou členy IFRA (prostřednictvím svých národních nebo regionálních sdružení) [4].

RIFM a IFRA oficiálně přijaly metodu Kvantitativního hodnocení rizika (QRA – *Quantitative Risk Assessment*), upravenou pro vonné látky označené jako kontaktní alergeny, jako základní strategii pro primární prevenci kožní senzibilizace těmito látkami ve spotřebitelských výrobcích. Tato nová metoda je významným vylepšením oproti bývalému postupu, protože se výhradně zabývá prvky expozice založenými na hodnocení rizika, které jsou specifické pro vyvolání kožní přecitlivělosti, při zachování zásad toxikologického

hodnocení rizika. Předchozí přístup pro kožní senzibilizaci používaný asociací IFRA byl kvalitativní a nebyl založený na hodnocení rizik z hlediska expozice. Strategie pro řízení rizik, používaná v minulosti asociací IFRA pro vonné ingredience označované jako alergenní, omezila použití těchto látek na jednotnou koncentraci pro všechny typy produktů určené ke kontaktu s kůží.

Na rozdíl od starého přístupu, kde produkty byly kategorizovány pouze do dvou skupin (výrobky aplikované a neaplikované na pokožku), v novém přístupu QRA bylo pro výrobky zavedeno jedenáct různých kategorií. Jelikož je expozice klíčovým prvkem pro určení kategorie, umožňuje to udržet příslušnou expozici, a tudíž bezpečnost, a také to poskytuje větší flexibilitu parfumérům, protože omezení není pro všechny výrobky stejné. To znamená, že u některých produktů je možná vyšší koncentrace alergenů, zatímco v jiných případech mohou být stanoveny nižší hladiny ve srovnání s těmi dříve používanými [29, 30].

2.3.2 Evropské směrnice

V Evropské Unii (EU) kosmetické přípravky nevyžadují povolení před uvedením na trh, za bezpečnost kosmetických přípravků je zodpovědný výrobce. Avšak u některých ingrediencí jako jsou UV filtry (příloha VI Kosmetické direktivy) nebo konzervační látky (příloha V Kosmetické direktivy) je potřeba před uvedením na trh schválit jejich bezpečnost pracovní skupinou zahrnující členské státy EU. Kosmetické přípravky v EU jsou primárně regulovány Nařízením Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1223/2009 [31].

Evropskoujinní Vědecký výbor pro kosmetické produkty a nepotravinové produkty určené spotřebitelům (SCCPNFP – *Scientific Committee on Cosmetic Products and Non-Food Products*), v současné době známý jako Vědecký výbor pro spotřební zboží (SCCP – *Scientific Committee on Consumer Products*), zveřejnil přehled o potenciálně alergenních substancích souvisejících s vonnými látkami. V této souvislosti vydala EU dodatek k příloze III EU Kosmetické direktivy (ES/1223/2009). Tato direktiva jasně stanovila podmínky použití 26-ti vonných látek, které mohou způsobovat alergické reakce. Z těchto 26 substancí, 24 látek jsou chemicky definované těkavé sloučeniny, zatímco zbývající dvě jsou přírodní mechové extrakty. Některé ze složek obsažených v těchto přírodních extraktech, jako je atranol a chloroatranol, prokázaly, že jsou kožní senzibilizátory. Přesto však nejsou v meších samy o sobě přítomny, ale vzniknou z degradace atranorinu a chloroatranorinu během extrakčního procesu. Tyto sloučeniny nejsou jako takové regulovány [3, 32-35].

Výše zmíněný dodatek v rámci EU systému ustanovuje výrobcům povinnost označit přítomnost jakékoli z výše zmíněných 26 látek na štítku produktu, jestliže je překročena hranice 0,01 % (100 mg.kg⁻¹) pro konečné výrobky typu *rinse-off* a 0,001 % (10 mg.kg⁻¹) pro výrobky typu *leave-on* [33-35]. Na rozdíl od ostatních vonných chemikálií, které není potřeba jednotlivě uvádět, ale mohou být seskupené a označené pod slovem „*parfume*“ nebo „*aroma*“ [34].

V dodatku nejsou pro tyto látky zahrnuta žádná omezení týkající se oblasti aplikace a/nebo použití a také žádné maximální povolené koncentrace ve finálním produktu s výjimkou některých silných alergenů jako např. hydroxycitronellal, který může být v kosmetickém přípravku použit do maximální výše 1 %_{w/w}. Pro ostatní alergeny z těchto 26-ti sloučenin existuje omezení v rámci Kosmetické direktivy, ale v důsledku jiných důvodů. Příloha A této práce také prezentuje rozdělení jednotlivých alergenů do skupin na základě potenciálu způsobovat kontaktní alergie. Skupina I reprezentuje závažné alergenní látky, skupina II

představuje jasně alergenní látky, ale méně závažné z hlediska frekvence přecitlivělosti a do skupiny III se řadí vzácné senzibilizátory nebo dokonce látky nesenzibilní [33].

SCCNFP nepřipouští zásadní rozdíl mezi přírodní surovinou (= komplexní vonný celek s nezaměnitelnou a jedinečnou identitou) a namíchanou směsí z jednotlivých chemických látek. 90 % přírodních surovin obsahuje vždy nejméně jeden z 26 alergenů [24].

Předpisy pro vonné látky v kosmetických produktech byly převzaty pro mycí a čistící přípravky podle nařízení ES/648/2004. Přítomnost některé z těchto 26-ti alergenních látek musí být označena na seznamu ingrediencí těchto typů produktů, jestliže její koncentrace přesáhne 0,01 %_{w/w} [33].

V EU jsou výrobci a dovozci povinni generovat bezpečnostní listy pro každý kosmetický výrobek zahrnující složení, specifikaci a posouzení bezpečnosti produktu na finálním výrobku stejně jako jeho složky. Bezpečnostní hodnocení musí být provedeno kvalifikovanými experty [31].

Kromě 26 potenciálně alergenních substancí zakazuje evropská Kosmetická direktiva podle přílohy II použití dalších více než 50 vonných substancí (včetně některých extraktů) v kosmetických produktech. Je třeba si dát obzvláště pozor na syntetické pižmo, zvláště na *musk ambrette*, které jsou spojeny s různými typy dermatitid, karcinogenními účinky a endokrinními dysfunkcemi. *Musk ambrette* a *musk tibetene* jsou v kosmetických produktech zakázány podle přílohy II, zatímco *musk xylen* a *musk keton* jsou přípustné s omezením podle přílohy III [3, 36]:

- 1) mošusový xylol užitý ve všech kosmetických přípravcích kromě přípravků pro ústní hygienu. Nejvyšší koncentrace v přípravku připraveném k použití: 1 % v parfémeh; 0,4 % v toaletních vodách; 0,03 % v ostatních výrobcích,
- 2) mošusový keton užitý ve všech kosmetických přípravcích kromě přípravcích pro ústní hygienu. Nejvyšší koncentrace v přípravku připraveném k použití: 1,4 % v parfémeh; 0,56 % v toaletních vodách; 0,042 % v ostatních výrobcích.

V rámci Nařízení (ES) 1223/2009, Článek 19, odstavce g) je ustanoveno: Na obalu, do kterého je kosmetický přípravek naplněn, a na jeho vnějším obalu, musí být ve srozumitelném, čitelném a nesmazatelném provedení uveden seznam přísad v sestupném pořadí podle hmotnosti v době jejich přidání do kosmetického přípravku. Seznamu musí předcházet slovo „*Ingredients*“. Seznam ingrediencí může být uveden jen na vnějším obalu. Za přísady se nepovažují nečistoty v použitých surovinách; technické pomocné materiály použité při mísení, které nejsou přítomny v konečném přípravku.

Parfémové a aromatické kompozice a jejich suroviny se uvádějí slovy „*parfum*“ nebo „*aroma*“. Látky, jejichž přítomnost musí být vyznačena v souladu s přílohou III, se uvádějí v seznamu ingrediencí bez ohledu na jejich funkci ve výrobku. Přísady v koncentracích menších než 1 % mohou být uvedeny v jakémkoliv pořadí po přísadách, jejichž koncentrace překračuje 1 %. Pokud z praktických důvodů nelze seznam ingrediencí uvést na obale, lze jej uvést na samolepce, pásce nebo příbalovém listu, který je vložen nebo připevněn na kosmetickém přípravku. Název ingredience musí být uveden podle společného názvosloví INCI přijatého jako společná nomenklatura Komisí Evropských společenství [36].

2.4 Legislativa vonných látek v oblasti hraček

2.4.1 Vyhláška č. 86/2011 Sb.

V současné době nabízí hračkářský průmysl širokou škálu různých výrobků, jejichž cílem je neustálé zdokonalování atraktivnosti hraček, což v sobě mnohdy skrývá neočekávanou hrozbu. Jelikož má dítě přímý kontakt s hračkou, je velmi důležité dbát na bezpečnost produktu z hlediska mechanických a fyzikálních vlastností a obsahu nebezpečných chemických látek.

Vyhláška č. 86/2011 Sb. zpracovává příslušné předpisy Evropské unie (Směrnice Evropského parlamentu a Rady 2009/48/ES ze dne 18. června 2009 o bezpečnosti hraček) a upravuje technické požadavky na hračky a podmínky pro jejich uvádění na trh.

Příloha č. 2 k nařízení vlády č. 86/2011 Sb., část III Chemické vlastnosti, bod 10 ustanovuje, že hračky nesmějí obsahovat alergenní vonné látky identifikované pod čísly 1-55. Přítomnost stopových množství těchto vonných látek je však povolena za předpokladu, že je tato přítomnost při správné výrobní praxi technicky nevyhnutelná a nepřekračuje 100 mg.kg^{-1} . Dále musí být na hračce na připojeném štítku, na obalu nebo na doprovodném letáku uvedeny názvy těchto alergenních vonných látek, pokud jsou přidávány do hračky jako takové v koncentracích vyšších než 100 mg.kg^{-1} v hračce nebo jejích součástech. Použití vonných látek zahrnujících 21 z 26-ti regulovaných alergenních látek, dále 3-fenyl-2-pentylprop-2-en-1-ol; 3-fenylprop-2-en-1-ol; 4-methoxybenzylalkohol; 2-benzylidenoktanal a 3-methyl-4-(2,6,6-trimethylcyklohex-2-en-1-yl)but-3-en-2-on je povoleno v hrách podněcujících čichové vjemy, kosmetických soupravách a hrách podněcujících chuťové vjemy pod podmínkou, že [37]:

- 1) tyto vonné látky jsou na balení jasně označeny a balení obsahuje upozornění „Tento výrobek obsahuje vonné látky, které mohou způsobit alergie“,
- 2) v případě kosmetických souprav splňují výsledné produkty vytvořené dítětem podle návodů požadavky Ministerstva zdravotnictví
- 3) tyto vonné látky případně splňují příslušné předpisy týkající se potravin.

2.5 Legislativa vonných látek v oblasti potravin

Zatímco přidávání regulovaných 26-ti alergenních vonných látek do kosmetických výrobků za účelem zvýšení jejich atraktivity je legislativně ošetřeno směrnicí ES/1223/2009, samostatný legislativní předpis pro tyto látky přidávané do potravin ve formě aditiv neexistuje. Níže uvedené předpisy jsou platné pouze pro celou skupinu látek definovaných obecně jako aromatické.

Až do roku 2012 platila v ČR vyhláška č. 447/2004 Sb. o požadavcích na množství a druhy látek určených k aromatizaci potravin, podmínky jejich použití, požadavky na jejich zdravotní nezávadnost a podmínky použití chininu a kofeinu (zpracovává směrnice EU 88/388/EHS a 91/71/EHS) [46]. Tato vyhláška však byla zrušena (vyhláškou 260/2012 Sb.) a problematika vonných látek v potravinách je v současné době legislativně ošetřena především Nařízením 1334/2008/ES a příslušnými prováděcími přílohami (793/2012/ES a 872/2012/ES).

Z látek sledovaných v této práci potravinářská legislativa limituje pouze kumarin [Nařízení 1334/2008/ES] kvůli jeho toxicitě. Kumarin má významný hemoragický účinek, který se vysvětluje antagonistickým působením k vitamínu K, čímž dochází k blokaci protrombinu

a řady dalších hemokoagulačních faktorů v játrech. Kromě toho je podezřelý z karcinogenních účinků [38, 39].

Kumarin nelze přidávat do potravin jako aditivum, může se však v některých potravinách nacházet jako přirozená složka, v takovém případě je jeho obsah limitován (*Tabulka 1*). V poslední době se EU zabývá obsahem kumarinu v různých druzích potravin obsahujících skořici. U těchto potravin byla zjištěna množství kumarinu, která několikanásobně překročila nejvyšší povolená množství stanovená evropskými předpisy, což je zvláště znepokojující u potravin konzumovaných ve větší míře dětmi (např. rýžová kaše s příchutí skořice) [40].

Tabulka 1 Maximální množství kumarinu přirozeně se vyskytujícího v látkách určených k aromatizaci a složkách potravin vyznačujících se aromatem v některých konzumovaných potravinách, k nimž byly přidány látky určené k aromatizaci nebo složky potravin vyznačujících se aromatem [41]

	Potraviny, v nichž je omezena přítomnost látky	Maximální množství v mg.kg⁻¹
Kumarin	Tradiční nebo sezónní pekařské zboží označené jako obsahující skořici	50
	„Snídaňové cereálie“ včetně müsli	20
	Jemné pečivo s výjimkou tradičního nebo sezónního pekařského zboží označeného jako obsahující skořici	15
	Dezerty	5

2.5.1 Ostatní předpisy pro vonné látky v potravinách

- Nařízení Evropského Parlamentu a Rady (ES) č. 1334/2008 o látkách určených k aromatizaci a některých složkách potravin vyznačujících se aromatem pro použití v potravinách nebo na jejich povrchu a o změně nařízení Rady (EHS) č. 1601/91, nařízení (ES) č. 2232/96 a č.110/2008 a směrnice 2000/13/ES.
- Nařízení komise (ES) č. 622/2002, kterým se stanoví lhůty pro předložení informací pro hodnocení chemicky definovaných látek určených k aromatizaci používaných nebo určených k použití v potravinách nebo na jejich povrchu.
- Nařízení Evropského Parlamentu a Rady 2232/96/ES, kterým se stanoví postup Společenství pro látky určené k aromatizaci používané nebo určené k použití v potravinách nebo na nich.
- Rozhodnutí komise 2004/357/ES, kterým se doplňuje rozhodnutí Komise 1999/217/ES, kterým se přijímá rejstřík aromatických látek používaných v potravinách.
- Nařízení Evropského Parlamentu a Rady (EU) č.1169/2011 o poskytování informací o potravinách spotřebitelům.

2.6 Analytické metody vhodné pro stanovení vonných látek

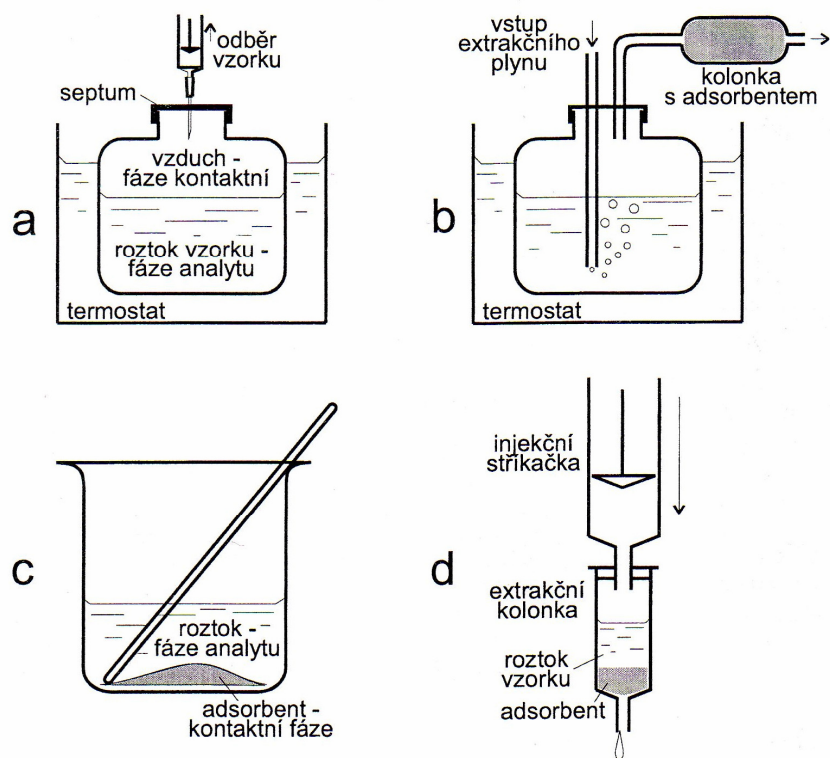
Nejčastěji používaná metoda ke stanovení vonných látek je v současné době plynová chromatografie, příp. plynová chromatografie s hmotnostní detekcí, která využívá jejich těkavosti. Vzhledem k tomu, že vonné látky se v potravinách i kosmetických výrobcích nacházejí většinou ve velmi nízkých koncentracích ($\mu\text{g}-\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$), kromě izolace z matrice vzorku bývá nezbytné i jejich zakoncentrování. K tomuto účelu lze použít řadu klasických i moderních extrakčních metod. V ideálním případě má být extrakční proces kvantitativní, rychlý, jednoduchý, nenákladný a umožňující automatizaci. K dnes již běžným postupům patří destilace, extrakce rozpouštědly, superkritická fluidní extrakce, tlaková fluidní extrakce, extrakce pomocí mikrovln, Soxhletova extraktorů nebo derivatizace za účelem zvýšení těkavosti nebo možnosti extrakce [42, 43].

Současný trend minimalizace používání organických rozpouštědel, vedený s ohledem na životní prostředí, se projevuje i v této oblasti a stále více se dříve používané zdoluhavé postupy s velkými spotřebami rozpouštědel nahrazují novými instrumentálními technikami, mezi které řadíme zejména extrakci a mikroextrakci na pevnou fázi, mikrovlnou extrakci, extrakci pomocí nadkritické tekutiny a extrakci rozpouštědlem za zvýšené teploty a tlaku. Tyto nové extrakční techniky vyžadují minimální množství vzorku, jsou méně časově náročné, automatizovatelné a vhodné pro možnost on-line zapojení se separačními technikami [42, 44].

2.7 Extrakce vonných látek z matrice vzorku

K zakoncentrování analytu z relativně velkého objemu fáze analytu do malého objemu kontaktní fáze – extrakčního činidla se využívá různých extrakčních technik [45, 46]:

- L-G extrakce (extrakce plynem, headspace analýza) – těkavý analyt přechází z roztoku do plynné fáze (**Obr. 1a**). K analýze se odebírá plynná fáze nad roztokem vzorku po ustavení rovnováhy. Účinnost extrakce lze zvýšit dynamickým provedením (**Obr. 1b**).
- L-S (extrakce tuhým sorbentem) – v roztoku vzorku se rozmíchá určité množství tuhého adsorbentu (**Obr. 1c**) nebo je roztok vzorku proléván sloupcem sorbentu (**Obr. 1d**).
- L-L extrakce (extrakce kapalinou) – z vhodného roztoku vzorku se analyt převádí do organického rozpouštědla.
- S-L extrakce (extrakce tuhých látek kapalinou) – analyt z tuhého vzorku je selektivně převeden (rozpuštěn) do vhodného rozpouštědla.



Obr. 1 Příklady provedení extrakce [45]

Bez ohledu na použitou metodiku je cílem analýzy stanovit celkový obsah vonných sloučenin. Proto jsou při stanovení aromatických sloučenin preferovány metody dávající největší výtěžnost, metody umožňující jednoduchou kalibraci a kvantifikaci. Konvenční metody jsou založeny na zachycení aromatických komponent na povrch vhodného sorbentu a na následné extrakci rozpouštědlem nebo termální desorpcí zachycených analytů [47].

2.7.1 Extrakce tuhou fází – SPE

Extrakce tuhou fází (SPE – *Solid Phase Extraction*) je jednostupňová metoda rozdělení analytu mezi dvě nemísitelné fáze, z nichž jedna je tuhá. Do této fáze přechází analyt z plynné nebo kapalné fáze. Technika má řadu výhod jako je rychlost, selektivita, citlivost, dobrá opakovatelnost, možnost automatizace a snadné spojení s řadou instrumentálních metod [46, 48].

Sorbenty používané v SPE jsou převážně polymerní a odpovídají jim různé mechanismy sorpce. Většinou se plní do krátkých kolonek, vzorkovacích terčů nebo fólií. V současné době roste zájem o sorpční materiály nanosené na povrch vláken.

Extrakce tuhou fází se používá ve farmacii, klinické chemii, toxikologii a potravinářství [46, 48].

2.7.1.1 Disperze tuhou fází matrice - MSPD

MSPD (*Matrix Solid-Phase Dispersion*) se řadí mezi jednoduché a levné extrakční metody vyžadující simultánní disrupci a extrakci pevných materiálů [49].

Principem metody MSPD je mechanické rozmělnění a homogenizace vzorku, který je v třecí misce smíchán s vhodným sorbentem. Po tomto kroku je směs vložena a napěchována do vhodné kolonky a analyty eluovány rozpouštědlem [49, 50].

MSPD je účinná technika, která byla aplikována např. na izolaci široké škály léčiv, pesticidů a přírodně vyskytujících se látek [49-51].

2.7.2 Extrakce tuhé látky kapalinou

Analyt ze vzorku pevného skupenství je selektivně převeden do vhodného rozpouštědla. Extrakce se obvykle provádí v přístroji, umožňujícím opakovanou extrakci, za účelem zvýšení extrakčního výtěžku. Nejčastěji používaným přístrojem pro extrakci tuhé látky kapalinou je Soxhletův extraktor, ve kterém se extrahují především organické látky (tuky, oleje, vonné látky) z různých přírodních tuhých materiálů do organických rozpouštědel. Mezi nevýhody této metody patří dlouhá doba extrakce a velká spotřeba rozpouštědel [46].

Extrakci lze značně urychlit zvýšením teploty a tlaku. K tomuto účelu se využívá extrakce rozpouštědlem pomocí regulovaného tlaku, extrakce mikrovlnným ohřevem rozpouštědla, extrakce ultrazvukem nebo superkritická fluidní extrakce. Při vyšší teplotě roste rozpustnost extrahovaných látek, zrychluje se transport hmoty, klesá viskozita a povrchové napětí rozpouštědel. Zvýšený tlak udržuje rozpouštědla v kapalném stavu. Tyto změny zlepšují kontakt analytů s rozpouštědlem a zvyšují účinnost extrakce [51, 52].

2.7.2.1 Extrakce organickým rozpouštědlem za zvýšené teploty a tlaku – PLE

Vysokotlaká extrakce rozpouštědlem neboli *Pressurized Liquid Extraction* (PLE), známá také pod názvem *Accelerated Solvent Extraction* (ASE), *Pressurised Fluid Extraction* (PFE), *High-Pressure Solvent Extraction* (HPSE) nebo *Subcritical Solvent Extraction* (SSE) je extrakční metoda, která je založena na principu extrakce z pevné látky do kapaliny a patří do skupiny metod urychlujících extrakční proces. Při této metodě je vzorek umístěn v extrakční cele v termostatu a pomocí extrakčního činidla je extrahován při vysoké teplotě a tlaku (50-200°C, 4-20 MPa). Eluát s extrahovanou látkou je následně jímán do sběrné nádoby. Na rozdíl od MAE nepotřebuje PLE žádný další filtrační krok, protože nerozpuštěné komponenty matrice zůstávají uvnitř extrakční cely [51, 52].

Výhodou extrakční metody PLE je její rychlost, rostoucí automatizace a malé množství organického rozpouštědla. Tato technika také nabízí možnost kontroly extrakční selektivity pomocí vkládání různých sorbentů do extrakční cely místo inertních materiálů. Metoda je využitelná pro potravinářské a biologické vzorky [51, 52].

2.7.2.2 Subkritická extrakce vodou – SHWE

Extrakce SHWE (*Superheated Water Extraction*), označována také jako *Subcritical Water Extraction* (SWE) nebo *Pressurised Hot Water Extraction* (PHWE), využívá jako rozpouštědlo horkou vodu, což vede k redukci organických rozpouštědel. Subkritická voda je charakterizována teplotami 100 – 374 °C a dostatečně vysokým tlakem (21,7 MPa) k udržení kapalného stavu [53].

Voda má díky své molekulární struktuře a schopnosti tvořit vodíkové vazby vysoký bod varu, vysokou dielektrickou konstantu a polaritu. S rostoucí teplotou polarita klesá a tím se extrakce stává selektivnější [51].

SHWE metoda je čistější, rychlejší, levnější a příznivější k životnímu prostředí ve srovnání s konvenčními metodami [51, 53].

2.7.2.3 Extrakce mikrovlnným ohřevem – MAE

MAE (*Microwave-Assisted Extraction*) je metoda, která se využívá pro zvýšení extrakční účinnosti klasické rozpouštědlové extrakce. Během extrakce je vzorek promícháván a zahříván, což je obzvlášť prospěšné k dosažení efektivní extrakce z pevných vzorků. Tato technika je aplikovatelná pouze na termostabilní sloučeniny v důsledku vysoké teploty během extrakce. Pro extrakci jsou používána polární rozpouštědla, protože nepolární neabsorbují mikrovlnnou energii [51]

MAE se hlavně používá jako alternativní metoda k Soxhletově extrakci, protože redukuje celkový čas extrakce a množství použitého rozpouštědla. Nejčastější využití nachází MAE v potravinářské chemii a chemii životního prostředí [51, 54].

2.7.2.4 Ultrazvuková extrakce – USE

Podobně jako metoda MAE se extrakce ultrazvukem (USE – *Ultrasonic Extraction*) také využívá ke zvýšení extrakční účinnosti. Ultrazvuková radiace usnadňuje předúpravu vzorku a urychluje extrakci organických a anorganických sloučenin z pevných a kapalných vzorků [51, 55].

V případě USE extrakce se volí takové rozpouštědlo popř. směs rozpouštědel, aby se dosáhlo maximální extrakční účinnosti a požadované selektivity. Výhodou této metody je, že lze vykonat několik extrakcí simultánně a není potřeba speciálního laboratorního vybavení. Metoda je tedy relativně finančně nenáročná v porovnání s jinými moderními technikami. Nevýhodou USE je obtížná automatizace extrakce [51, 54, 55].

2.7.2.5 Superkritická fluidní extrakce – SFE

Superkritická fluidní extrakce (SFE – *Supercritical Fluid Extraction*) je proces separace jedné složky od ostatních použitím superkritické tekutiny jako extrakčního rozpouštědla. Superkritická tekutina je specifický skupenský stav, který spojuje vlastnosti kapalin a plynů. Tento stav nastane, pokud je na tekutinu vyvíjen tlak a teplota nad jejím kritickým bodem.

Nejběžněji používaným rozpouštědlem je oxid uhličitý, který má nízké kritické parametry (31,3 °C a 7,29 MPa), je levný, snadno dostupný ve vysoké čistotě, je netoxický, nehořlavý, šetrný k životnímu prostředí a lze ho snadno po extrakčním kroku odstranit ze vzorku. Nevýhodou této metody je vysoká pořizovací cena a provozní náklady [56].

Superkritická fluidní extrakce byla použita např. k extrakci kofeinu z kávových bobů, extrakci aroma z alkoholických nápojů, extrakci a izolaci esenciálních olejů, frakcionaci tinktury propolisu aj. [56, 57]. SFE metoda se v současné době používá v mnoha oblastech potravinářství, farmacie a životního prostředí.

2.7.3 Extrakce kapalinou

Ke zkoncentrování složek z plynů nebo vodných roztoků lze využít různých rozpouštědel schopných rozpouštět jednotlivé komponenty obsažené v analyzovaném vzorku. V případě analýzy vodných roztoků jde o extrakci složek vytřepáváním. V případě plyných vzorků jde o absorpci složek do kapaliny, tzv. odlučování (*trapping*). Samostatnou variantou je tzv.

extrakčně-destilační způsob obohacení (SDE – *Steam Distillation Extraction*), jenž je využitelný k izolaci a zkoncentrování nepolárních i polárních těkavých organických látek [46, 58].

Použití destilace jako prvního stupně má výhodu v tom, že do extraktu se nedostávají extrahovatelné látky, které se při běžném způsobu extrakce extrahují. Jsou to např. tuky, vosky, pryskyřice, detergenty a další [45].

V posledních letech bylo úsilí zaměřeno na miniaturizaci extrakčního postupu kapalinou, což výrazně redukuje množství extrakčního činidla a vede k vývoji mikroextrakčních metod rozpouštědlem [59].

2.7.3.1 Mikroextrakce kapalnou fází – LPME

Inovací v oblasti extrakce kapalnou fází je metoda LPME (*Liquid Phase Microextraction*), která využívá nemísitelné kapalnou filmy ve dvou nebo třífázových systémech [60, 61].

Dvoufázová mikroextrakce se obvykle provádí tím, že se uvolní kapka organického rozpouštědla na špičku teflonové tyčinky nebo na špičku jehly mikrostríkačky, která je ponořena do míchaného vodného roztoku vzorku. Analyty jsou extrahovány do organického rozpouštědla a následně přímo injektovány do GC. V případě třífázové mikroextrakce jsou analyty ve vodném vzorku extrahovány buď pomocí tenkého filmu organického rozpouštědla uvnitř pórů polypropylénového dutého vlákna, nebo pomocí organického rozpouštědla držného uvnitř teflonového kruhu. Po tomto kroku jsou analyty zpětně extrahovány do dalšího vodného roztoku a analyzovány nejčastěji HPLC [62].

Hlavní výhodou této techniky je menší spotřeba rozpouštědla a spojení extrakce, zkoncentrování a zavedení vzorku do jednoho kroku [60-62].

2.7.3.2 Mikroextrakce jednou kapkou – SDME

Principem SDME (*Single Drop Microextraction*) je interakce malého množství extrakční fáze nadbytkem vzorku. SDME je proces založený na ustanovení rovnováhy mezi vzorkem a kapkou extrakčního rozpouštědla nemísitelného se vzorkem. Metoda SDME může být použita dvěma způsoby: přímou extrakcí, kde extrakční kapka je tvořena pomocí špičky jehly pod hladinou kapaliny, nebo metodou headspace, kde kapka organického rozpouštědla je vytvořena v headspace prostoru nad vzorkem. U této metody odpadá proces desorpce analytu z extrakční fáze. Získaný extrakt obsahující zachycené sloučeniny je přímo zaveden do plynového chromatografu [51, 63, 64].

Metoda je využívána v různých oblastech životního prostředí a v potravinářství např. pro stanovení alkoholů v pivě nebo silic v bylinných nápojích [51, 63].

2.7.4 Extrakce plynem - headspace analýza

V posledních letech dominují extrakčním analýzám *headspace* (HS) metody, které jsou založené na těkavosti stanovovaných látek, a které mohou nahradit nákladná rozpouštědla. Pojmem „*headspace*“ se označuje prostor nad maticí vzorku v uzavřené nádobě. Headspace metoda je definována jako nepřímé stanovení těkavých sloučenin analýzou koexistující plynné fáze. Do kolony analyzátoru jsou dávkovány pouze páry a nedochází k akumulaci netěkavých komponent. Metodou headspace je možné analyzovat jak homogenní kapaliny a tuhé látky, tak i nehomogenní materiály, které mohou být kapalnou i tuhou. Headspace metodu lze použít buď ve statickém (S-HS) nebo dynamickém (D-HS) módu [46, 58, 60, 65, 66].

2.7.4.1 Statická headspace

Při statické HS je vzorek hermeticky uzavřen ve vhodné vzorkovací nádobě a temperován do ustanovení rovnováhy mezi plynnou fází a vzorkem. Páry uvolněné do prostoru nad matricí vzorku jsou následně odebrány a převedeny do plynového chromatografu pomocí plynotěsné stříkačky nebo vhodného sorbentu.

Výhodou této techniky je, že nepoškozuje vzorek nebo těkavé komponenty. Tento typ vzorkování je obzvláště využíván pro stanovení aromatických a vonných komponent [46, 58, 66, 67].

2.7.4.2 Dynamická headspace

Při dynamické HS je do prostoru nad vzorkem přiváděn inertní plyn, který následně prochází sorpční trubicí, ve které jsou zachycovány uvolněné těkavé látky. Zachycené látky jsou v druhém kroku převedeny na chromatografickou kolonu. Koncentrace složek v obou fázích s časem kontinuálně klesá a blíží se asymptoticky nule [45, 60, 66, 67].

V případě „*purge and trap*“ prochází inertní plyn na rozdíl od D-HS vzorkem a plyn je dále veden přes vhodný sorbent, na němž se zkoumané analyty zachytí. Ze sorbentu jsou analyty eluovány rozpouštědlem nebo tepelně desorbovány [51, 60].

2.7.5 Mikroextrakce tuhou fází – SPME

Na základě provedené literární rešerše bude v této práci pro extrakci vonných látek ze vzorků použita metoda SPME. Mikroextrakce tuhou fází je jednoduchá a účinná sorpčně/desorpční technika zakoncentrování analytu, která nevyžaduje rozpouštědla nebo komplikované aparatury. Principem je expozice malého množství extrakční fáze nadbytkem vzorku. Na rozdíl od klasických extrakčních metod není analyt extrahován ze vzorku v co nejvyšší koncentraci, ale pouze do dosažení rovnovážného stavu. Rovnováha se ustanovuje mezi koncentrací analytu ve vzorku, headspace prostorem nad vzorkem a polymerní vrstvou na křemenném vlákne. Metoda je rutinně využívána ve spojení s plynovou chromatografií, ale v některých případech také s kapalinovou chromatografií [51, 58, 66, 68-73].

Podstatou metody SPME je křemenné vlákno o úzkém průměru, které je pokryto vhodnou stacionární fází o dané polaritě. Podle sorpčního mechanismu lze vlákna rozdělit na absorbenty³ (tenký homogenní polymerní film) a adsorbenty⁴ (směs polymerů smíchaných s pórovitým karbonovým materiálem). Pro dosažení reprodukovatelných výsledků a maximálních výtěžků je důležitá volba vhodného typu polymerní vrstvy. Přehled komerčně dostupných vláken a jejich vlastností uvádí **Tabulka 2** [72-74].

³ Mají většinou větší extrakční kapacitu a nedochází ke kompetitivní sorpci mezi analyty. Homogenním polymerem může být PDMS (*polydimethylsiloxan*) a PA (*polyamid*). Sorpce závisí na tloušťce vrstvy. Vykazují vyšší meze stanovitelnosti a široký lineární rozsah.

⁴ Mají nižší mechanickou stabilitu, ale vyšší selektivitu. Např. DVB a/nebo CAR™. Mají limitovanou kapacitu. Dochází k nežádoucí kompetitivní sorpci.

Tabulka 2 Přehled komerčně dostupných SPME vláken [73-75]

Stacionární fáze	Tloušťka vrstvy	Doporučeno pro analýzu	Pracovní teplota [°C]
PDMS	100 μm	GC/HPLC	200-280
	30 μm	GC/HPLC	200-270
	7 μm	GC/HPLC	220-320
PDMS/DVB	65 μm	GC	200-270
	60 μm	HPLC	
PA	85 μm	GC/HPLC	220-310
CAR™/PDMS	75 μm	GC	250-310
	85 μm	GC	
CW™/DVB	65 μm	GC	200-250
	70 μm	GC	
DVB/CAR™/PDMS	50μm/30μm	GC	230-270

Mikroextrakce tuhou fází je často používána pro stanovení chuťových, vonných a kontaminujících látek v potravinách, nachází uplatnění v toxikologii, v životním prostředí a farmacii. Je jednoduchá, rychlá, finančně dostupná, nenáročná na objem vzorku a nevyžaduje žádná organická rozpouštědla.

SPME je použitelná v kombinaci s náplňovými i kapilárními kolonami v plynové chromatografii a je možné ji použít i ve spojení GC-MS [51, 58, 66, 69-75].

2.7.5.1 In-tube SPME a SPDE

Podstatou metody In-tube SPME je otevřená kapilára, na jejíž vnitřní stěně je nanášena stacionární fáze. Organické sloučeniny jsou do této stacionární fáze ze vzorku přímo sorbovány a poté desorbovány pomocí proudu mobilní fáze nebo statického desorpčního rozpouštědla. In-tube SPME je vhodná pro spojení s HPLC nebo LC-MS [51, 60, 69].

Poslední variací dynamické In-tube SPME je dynamická extrakce tuhou fází (SPDE – *Solid Phase Dynamic Extraction*). Princip této metody je obdobný jako u SPME s tím rozdílem, že sorbent je nanášen na vnitřní povrch jehly plynotěsné stříkačky. Výhodou této metody je větší množství extrakční fáze, větší plocha povrchu, možnost proudění vzorku přes aktivní sorbent a kratší doba extrakce [51, 60].

2.7.6 Sorpční extrakce míchadlem – SBSE

Sorpční extrakce míchadlem (SBSE – *Stir Bar Sorptive Extraction*) byla vyvinuta pro překonání omezené extrakční kapacity SPME vlákna. Princip této metody je založen na sorpci analytů na skleněnou míchací tyčinku potaženou silnou absorpční fází (nejčastěji PDMS), kterou se po určité době míchá vzorek. Zachycené látky jsou po ukončení sorpce buď termálně desorbovány a nebo jsou pomocí organického rozpouštědla z míchadla uvolněny a převedeny na chromatografickou kolonu [51, 66, 76].

Metoda SBSE je využívána především v potravinářství, ale z důvodu omezení PDMS stacionární fáze, je aplikace SBSE vymezena na nepolární a málo polární analyty [51].

2.8 Instrumentální metody pro stanovení vonných látek

Ke stanovení vonných látek a jejich prekursorů lze v současné době použít řadu chromatografických metod. Nejvhodnější a nejčastěji používaná metoda je plynová chromatografie díky své vysoké rozlišovací schopnosti a dostupnosti univerzálních detekcí pomocí plamenově ionizačního detektoru, tepelně vodivostního detektoru, hmotnostního detektoru nebo kvadrupólového hmotnostního detektoru. Mimo tyto kombinace lze plynovou chromatografii také kombinovat s tandemovou hmotnostní spektrometrií (GC-MS/MS), což vede k větší specifičnosti a selektivitě, které jsou nezbytné pro přesnou identifikaci komponent v komplexnějších vůních [3, 34, 77, 78].

Další možností tandemové techniky je systém založený na kombinaci dvou separačních mechanismů s cílem zvýšení separační účinnosti celého systému [65, 77-80].

2.8.1 Multidimenzionální plynová chromatografie (MDGC)

Multidimenzionální separace je definována jako ortogonální separace, která kombinuje dva a více separačních/analytických kroků. V současné době existují dva typy multidimenzionální chromatografie: konvenční *heart-cut* MDGC a komprehensivní dvoudimenzionální chromatografie GC × GC [81].

2.8.1.1 Heart-cut MDGC

Tato technika je známá tím, že poskytuje kvantitativní stanovení jedné nebo více frakcí, které byly přeneseny z první kolony a dále separovány na druhé koloně. Multidimenzionální systém vykonává separaci s použitím 2 kolon, které mají odlišný charakter. První kolona je nepolární (30-60 m) a druhá kolona je polárnější (cca 30 m). Systém obsahuje mechanismus, ve kterém nedostatečně oddělené komponenty ve frakcích z první kolony přecházejí na druhou kolonu pomocí tzv. *Heart-cut* systému. Frakce eluentu z první kolony nemusí být přenesená na sekundární kolonu ihned, může být zachycená v kryogenním systému a přenesená později [35, 81].

Technika je vhodná v případě, že informace z druhé dimenze jsou potřeba jen pro několik frakcí (*target analysis*). Screening celého vzorku je velmi časově náročný.

MDGC technika se využívá pro analýzu aromatických látek, esenciálních olejů a ropných produktů [35].

2.8.1.2 GC × GC

GC × GC konfigurace je efektivní dvoudimenzionální metoda, která se skládá ze dvou kapilárních kolon spojených modulátorem. V nejčastější konfiguraci je primární kolona standardních rozměrů s nepolární stacionární fází (15-30 m), zatímco sekundární kolona je krátká a úzká (0,5-2 m). Pokud je primární kolona nepolární, separace je založena na bodu varu jednotlivých složek a lze předpokládat, že sloučeniny koelující na primární koloně mohou mít docela odlišné chemické vlastnosti, které mohou být využity jako základ pro separaci na druhé koloně. Krátká sekundární kolona umožňuje velmi rychlou separaci během sběru frakcí z první kolony [65, 80].

Důležitou částí systému je modulátor, který akumuluje frakce z první kolony na krátký úsek kolony a následně je rychle propustí na druhou kolonu. Eluenty tudíž neprotékají

z primární kolony na druhou kontinuálně, ale periodicky. Modulátor vykonává funkci termální desorpce nebo kryofokuse [65, 80].

Nevýhodou této metody jsou vysoké pořizovací náklady a komplikovaná optimalizace [80].

2.8.2 GC-Olfaktometrie – GC-O

Plynová chromatografie v kombinaci s olfaktometrem je hybridní metoda, která spojuje vysoké rozlišení chromatografické separace se sensorickým hodnocením vůně. Tato technika používá lidský nos jako detektor k rozeznání jednoduchých těkavých sloučenin eluujících z kapilární kolony plynového chromatografu [82].

Hodnotitel popisuje kvalitu vůně, zaznamenává čas a dobu trvání v případě, že je vůně detekována a/nebo odhaduje její intenzitu. Tato metoda se v praxi používá ke zjištění charakteru vůně různých těkavých látek a k jejich stanovení především v potravinách [83].

2.8.3 Ostatní instrumentální metody

I když může být plynová chromatografie s hmotnostní detekcí pokládána za výběrovou chromatografickou techniku pro stanovení těkavých látek jako jsou vonné směsi, alergenní látky v přítomnosti jiných netěkavých složek je možné efektivně identifikovat a kvantifikovat také vysokoúčinnou kapalinovou chromatografií [84, 85], micelární elektrokinetickou chromatografií [86] a kapilární elektroforézou [86].

Důležitá je také při analýze přírodních esenciálních olejů optická izomerie. Optické izomery existují v esenciálních olejích buď jednotlivě v D- nebo L- formě nebo jako směs, v níž jedna z forem existuje ve větším množství než ta druhá. Chirální kolony mohou být využity k separaci a kvantifikaci odlišných optických izomerů ze stejné chemické sloučeniny [3].

2.9 Aplikace extrakčních a instrumentálních metod v kosmetologii

Přítomnosti alergenních vonných látek v kosmetických produktech je v současné době věnována velká pozornost a byla publikována již řada prací, které aplikují různé kombinace výše zmíněných metod pro testování širokého spektra kosmetických a jiných výrobků.

Sgorbini a kol. [87] použili extrakci sorpční páskou (STE – *Sorptive Tape Extraction*), která je aplikována na povrch pokožky ošetřené zkoumaným krémem. Pomocí této techniky jsou analyty přípravku sorpčně akumulovány na tenkou flexibilní PDMS pásku a následně po tepelné desorpci analyzovány plynovou chromatografií. Metoda byla použita na stanovení 13-ti vybraných alergenních látek po ošetření referenčním krémem obohaceným o známé množství standardní směsi zkoumaných sloučenin a následně po ošetření komerčně dostupnými krémy, jejichž etikety deklarují přítomnost alergenních látek v přípravku.

Během posledních dvou let byla vyvinuta tlaková extrakce rozpouštědlem (PSE – *Pressurized Solvent Extraction*) ve spojení s GC-MS analýzou pro stanovení regulovaných vonných alergenů v *leave-on* produktech. Metoda PSE se osvědčila jako účinná a rychlá technika pro extrakci tohoto druhu sloučenin v kosmetických vzorcích. Hlavní nedostatek této metody spočíval ve vysokých pořizovacích a provozních nákladech ve srovnání s jinými extrakčními technikami, jako např. extrakce disperzní tuhou fází (MSPD). Sanchez-Prado a kol. [23] využili metodu SPE ve spojení s GC-MS pro identifikaci a kvantifikaci 25-ti regulovaných vonných alergenů v *leave-on* a *rinse-off* produktech. Vzorek kosmetického

přípravku byl smíchán s bezvodým síranem sodným a s disperzním sorbentem. Vzniklá homogenní směs byla převedena do kolonky na dně opatřené polypropylenovou fritou a eluována pomocí ethylacetátu. Extrakty získané touto technikou byly v případě nutnosti ředěny (1:10 až 1:1000) a následně přímo analyzovány GC-MS.

Lamas a kol. [88] aplikovali pro přípravu vzorku obsahujícího regulované alergenní látky tlakovou kapalinovou extrakci (PLE). Získaný extrakt analyzovali metodou GC-MS. Metoda PLE ve spojení s GC-MS byla aplikována na *leave-on* produkty zahrnující hydratační krémy, krémy proti vráskám, krémy na ruce, krémy na opalování a krémy po opalování. Kosmetický vzorek byl důkladně smíchán s bezvodým síranem sodným a disperzním sorbentem. Extrakce byla provedena pomocí systému ASE 200 (Dionex, Co., Sunnyvale, CA, USA) vybaveným 24 pozicemi karuselu, 11-ml nerezovými celami a 40-ml sběrnými celami. Jako extrakční rozpouštědlo byl použit ethylacetát nebo hexan/aceton (1:1).

Později Lamas a kol. [89] využili pro identifikaci a kvantifikaci 15-ti nejběžnějších alergenních vonných látek v koupelové vodě obsahující přípravky určené pro dětské koupání (šampony, sprchové gely a mýdla) extrakční metodu mikroextrakce tuhou fází ve spojení s GC-MS. Extrakční technika byla založena na vzorkování z *headspace* prostoru pomocí PDMS/DVB vlákna (polydimethylsiloxane/divinylbenzen). Stejnou analytickou metodu HS-SPME-GC a stejný typ SPME vlákna použili Becerril a kol. [90] na analýzu 26-ti alergenních vonných látek ve vzorcích vod, které zahrnovaly koupelovou vodu určenou pro děti, vodu v plaveckých bazénech a vzorky odpadních vod. Ve výzkumu vonných alergenních látek ve vodách pokračovali Becerril a kol. [91] i nadále a na stejnou sadu reálných vzorků využili odlišný extrakční krok, a to ultrazvukem asistovanou emulgaci a mikroextrakci (USAEME – *Ultrasound-Assisted Emulsification-Microextraction*). Technika byla založena na emulgaci organického extraktu ve vodném vzorku pomocí ultrazvukové radiace a na separaci obou kapalných fází pomocí odstředění.

Debonneville a Chaintreau [92] kvantifikovali regulované alergenní vonné látky ve vonných koncentrátech pomocí dvoudimenzionální plynové chromatografie s hmotnostním spektrometrem vybaveným kvadrupólem (GC x GC-qMS). Analýza byla provedena pomocí dvou kapilárních kolon s odlišnou selektivitou (nepolární x polární), které byly spojeny do série pomocí modulátoru. Tato technika poskytovala kvalitnější separaci, vyšší citlivost, výkonnost, selektivitu a relativně krátkou dobou analýzy.

Dunn a kol. [77] zkoumali a porovnali dvě analytické metody pro analýzu regulovaných alergenních vonných látek v osvěžovači vzduchu. První technika se opírala o dvoudimenzionální plynovou chromatografii (GC x GC) využívající jak konvenční (nepolární/polární), tak inverzní (polární/nepolární) kombinaci kolon. Druhá metoda byla založena na multidimenzionální plynové chromatografii (MDGC) s nepolárním/polárním uspořádáním kolon. Na rozdíl od GC x GC měla metoda MDGC delší druhou dimenzionální kolonu, kryogenní past na začátku druhé kolony a pneumatický spínač spojující obě kolony.

Niederer a kol. [93] aplikovali na přípravu kosmetických vzorků vylučovací chromatografii SEC (*Size Exclusion Chromatography*), také nazvanou gelová permeační chromatografie, která byla využita jako přečišťovací metoda. Po úpravě vzorku následovala analýza metodou GC-MS. Cílem této studie byla kvantifikace kosmetických přípravků (krémy, tělové mléka, oleje) o nízkém obsahu vonných látek v extrémně komplexních matricích. Jako velká výhoda tohoto tandemu analytických metod byla flexibilita čištění pomocí SEC techniky v kombinaci s vysokou citlivostí a specifičností metody GC-MS.

Cordero a kol. [94] se zaměřili na dvoudimenzionální plynovou chromatografii spojenou s kvadrupólovým hmotnostním spektrometrem (GC x GC-qMS) a plamenově ionizačním detektorem (GC x GC-FID). V první řadě byla studována účinnost metody GC x GC-qMS na základě identifikace a kvantifikace těkavých alergenů v komplexních vůních. Obě analytické metody vhodné ke stanovení vonných alergenů byly poté validovány pomocí následujících parametrů: konfirmace identity, selektivita a specifičnost, limit detekce, limit kvantifikace, linearita (pracovní a lineární rozsah), přesnost a správnost.

Metodou dvoudimenzionální plynové chromatografie se také zabývali Shellie a kol. [95], kteří zkoumali vhodnost této metody z hlediska požadavků pro kontrolu kvality vůní, tzn. pro stanovení koncentrací regulovaných sloučenin v parfémeh.

Rastroggi a kol. [96] použili pro kvantitativní analýzu vybraných vonných alergenů GC-MS. Metoda byla aplikována na deodoranty, které byly označeny „bez parfemace“ a zahrnovaly roll-on produkty a aerosolové spreje. Stejný tým vědců [97] i nadále pracoval s metodou GC-MS a rozšířili své bádání o monitoring alergenních vonných látek v kosmetických přípravcích určených pro děti (šampóny, sprchové gely, dětské ubrousky, tělové krémy a oleje).

Podrobnější studii zaměřenou na stanovení vonných sloučenin ve vonných koncentrátech zveřejnili Chaintreau a kol. [98]. Kvantifikace cílových sloučenin byla provedena pomocí GC-MS v SIM režimu (SIM – *Selected Ion Monitoring*) pomocí tří iontů pro každou komponentu: jeden ion pro kvantifikaci a dva pro identifikaci píku.

Vylepšenou metodu GC-MS využili také Leijs a kol. [99]. Plynový chromatograf operoval dvěma injektory, přičemž každý injektor byl spojen s kolonou různé polaroty. Každý vzorek byl postupně analyzován na každé koloně v režimu *full-scan*. Analýza byla aplikována na kvantitativní stanovení 26-ti alergenních vonných látek v parfémových směsích.

Efektivitou stanovení alergenních látek ve vonných koncentrátech pomocí GC-MS se zabývali Bassereau a kol. [100], kteří zkoumali variabilitu pro tři různé strategie vyhodnocení dat: pro dvě kolony a tři kvantifikační ionty, dvě kolony a jeden kvantifikační iont, jednu kolonu a tři kvantifikační ionty.

Rychlou plynovou chromatografii s kvadrupólovým hmotnostním spektrometrem pracující v režimu *full-scan* využili pro kvalitativní a kvantitativní stanovení alergenních látek v parfémeh Mondello a kol. [101]. Stěžejní zdokonalení této techniky oproti jiným metodám spočívalo především ve velmi krátké době analýzy (5 minut). V další práci Mondello a kol. [84] využili dvoudimenzionální plynovou chromatografii s hmotnostním spektrometrem v kombinaci s kvadrupólem a srovnali tuto metodu s jednokolonovou plynovou chromatografií s kvadrupólovým hmotnostním spektrometrem. Obě metody byly aplikovány na parfémovou analýzu. Podobnou problematikou se také zabýval Adahchour a kol. [102], kteří využili metodu GC-GC-qMS pro analýzu alergenních vonných látek v parfémeh, komplexních aromatických směsí v potravinách a polychlorovaných bifenyly.

Furlanetto a kol. [86] využili pro simultánní stanovení 18-ti regulovaných alergenních vonných látek mikroemulzní elektrokinetickou chromatografií (MEEKC) a kapilární elektroforézou (CE). Tyto látky byly vybrány, neboť se jedná o UV-aktivní sloučeniny s různými vlastnostmi polaroty a jsou proto detekovatelné pomocí CE používající pseudo-stacionární fázi tvořenou mikroemulzí. K ověření vhodnosti založené metody pro kvantitativní analýzu byla vyšetřována selektivita, robustnost, linearita, přesnost a správnost. Ověřená metoda byla aplikována na analýzu alergenních vonných látek v *rinse-off* přípravcích jako jsou šampóny a koupelové gely.

Méně využívanou metodou v oblasti alergenních vonných látek je metoda difúzní reflexe (DRIFTS). Tuto techniku využili Kuo a kol. [103] na stanovení eugenolu, isoeugenolu a dalších derivátů v esenciálním oleji Ylang-Ylang a srovnali ji s plynovou chromatografií.

Villa a kol. [84] použili pro simultánní stanovení a kvantifikování regulovaných alergenních látek v komerčně dostupných produktech, jako je repelent proti hmyzu, masážní olej obsahující esenciální oleje, hydratační krém a kondicionér na vlasy metodu vysokoúčinné kapalinové chromatografie s detektorem diodového pole (HPLC-DAD).

Hiserodt a kol. [104] zaměřili svůj výzkum na méně známý regulovaný alergen mech dubový, který obsahuje sloučeniny vyvolávající alergické reakce. Cílem jejich studie bylo zjistit identitu těchto látek a podpořit vývoj dubového mechu se sníženým alergenním potenciálem, aniž by se změnila jeho kvalita vůně. Na identifikaci komponent byla použita kapalinová chromatografie ve spojení s tandemovým hmotnostním spektrometrem (LC-MS/MS).

Wang a Liu [85] využili HPLC metodu v kombinaci s fluorimetrickým detektorem na stanovení alergenních vonných látek v esenciálních olejích. Pozornost byla věnována devíti alergenům, mezi kterými byl také identifikován cinnamylalkohol, eugenol a isoeugenol.

Masuck a kol. [105] využili headspace mikroextrakci tuhou fází (HS-SPME) ve spojení s GC-MS pro stanovení exhalace vonných alergenů z parfémovaných dětských hraček. Na extrakci, optimalizaci extrakčních podmínek a kvantifikaci alergenních látek bylo použito polární polyakrylátové SPME vlákno. Masuck a kol. [106] tuto problematiku studovali dále a zveřejnili studii, která se zabývala stanovením emisní rychlosti 24 vonných alergenů z PVC referenčního materiálu simulujícího skutečnou plastovou hračku, výpočtem emisní koncentrace vonných alergenů přítomných ve čtyřech reálných hračkách a výpočtem denní inhalační expozice dětí ve věku 1 roku a starších.

Vývojem a optimalizací metody mikroextrakce tuhou fází ve spojení s GC-FID se zabývali Chen a kol. [107]. Optimalizace extrakčních podmínek byla provedena pomocí SPME vlákna se sorpční vrstvou z PDMS. Optimalizovaná metoda byla aplikována na stanovení vybraných parfémových sloučenin (geraniol, linalool) v různých druzích šampónů.

Většina publikovaných studií se zabývá stanovením pouze jedné skupiny ingrediencí jako jsou regulované alergenní vonné látky. Sanchez-Prado a kol. [108] představili multi-komponentní analytickou metodu GC-MS s konfigurací iontové pasti, která byla použita na separaci a identifikaci 52 sloučenin náležících do čtyř rozdílných skupin kosmetických ingrediencí zahrnujících 26 regulovaných vonných alergenů, ftaláty, syntetické „musk“ sloučeniny a konzervanty.

Jirovetz a kol. [109] se zabývali esenciálním olejem růže damašské z Číny. Cílem jejich studie bylo identifikovat vonné látky zmíněného esenciálního oleje pomocí olfaktorických metod a také tyto látky kvantifikovat prostřednictvím plynové chromatografie (GC-FID a GC-MS). V esenciálním oleji bylo identifikováno 71 těkavých látek, mezi kterými dominoval citronellol, geraniol, citral, linalool, limonen, eugenol a farnesol.

Analýzou těkavých složek z růže damašské se také zabývali Özel a kol. [110]. Hlavními cíli jejich studie bylo charakterizovat složení těkavých frakcí získaných z okvětních lístků růže pomocí dvoudimenzionální plynové chromatografie ve spojení s hmotnostním spektrometrem a TOF (*time of flight*) analyzátozem a srovnat tato složení s ohledem na použité izolační techniky jako je přímá tepelná desorpce (DTD – *Direct Thermal Desorption*), extrakce přehřátou vodou (SWE) a destilace vodní parou (WD – *Water Distillation*).

Ortiz a Tena [111] studovali interakci obalového materiálu a baleného produktu, konkrétně migraci, permeabilitu a absorpci. Toto vzájemné působení je zodpovědné za vyvolání změn v organoleptických vlastnostech produktu a ve vlastnostech obalu. Pro identifikaci kosmetických komponent, které migrují přes polyetylénovou vrstvu a způsobují ztrátu adheze mezi vrstvami vícevrstevných obalů a delaminaci v obalových kompozitech, byla využita metoda SPME-GC-MS. Byly kontrolovány tři přípravky, a to dva druhy šampónů a lubrikační gel. Ve vnitřních vrstvách laminového materiálu byly pomocí CAR/PDMS vlákna detekovány některé sloučeniny používané v kosmetickém průmyslu jako jsou vonné látky. Mezi identifikovanými látkami v přípravcích na vlasy byly detekovány tyto vonné alergeny: limonen, linalool, geraniol, α -isometyl ionon, benzylalkohol, linalil, eugenol. V lubrikačním gelu byl nalezen pouze jedna alergenní látka, limonen.

Lamas a kol. [112] se zabývali stanovením 24 alergenních vonných látek ve vzorcích vzduchu sbíraných z různých domácích prostor zahrnující kuchyň, obývací pokoj, chodbu, ložnici, komoru, prádelnu a také auto. Vzorky vzduchu z prostoru auta byly odebrány po aplikaci aerosolových produktů jako jsou insekticidy, osvěžovače vzduchu nebo difuséry. Pro analýzu byla využita metoda sorpce na pevný sorbent Florisil a Tenax TA v kombinaci s SPME (SPE-SPME) a GC-MS, přičemž nejdůležitějším krokem metody byl přechod analytů ze sorbentu do headspace prostoru a poté do SPME vlákna. Stacionární fází SPME vlákna byla vrstva DVB/CAR/PDMS.

Gomes a kol. [113] aplikovali superkritickou fluidní extrakci (SFE) k výrobě přírodního extraktu z portugalské pelargónie tzv. gerániového oleje, který se využívá především v parfumérství. Získaný extrakt byl charakterizován pomocí metody GC/MS. Mezi stanovenými vonnými látkami dominoval především citronellol, geraniol a v menším množství také linalool.

2.10 Aplikace extrakčních a instrumentálních metod v potravinářství

Studii zaměřených na sledování alergenních vonných látek v potravinách je podstatně méně. Převážná většina prací se navíc zaměřuje na stanovení obecně všech vonných látek a mezi nimi bývají detekovány i některé z alergenních.

Högnadóttir a Rouseff [114] studovali aromatickou aktivitu sloučenin v pomerančovém esenciálním oleji a jeho celkovou senzoryckou kvalitu s použitím plynové chromatografie s olfaktometrem (GC-O), plynové chromatografie s hmotnostním spektrometrem a plamenově ionizačním detektorem. Mezi vonnými látkami byly také stanoveny čtyři alergenní vonné látky a to limonen, linalool, citronellol a geraniol.

Plynovou chromatografií ve spojení s olfaktometrem také využili Wang a kol. [115], kteří se zabývali vonnými látkami v různých druzích čajů zahrnující zelené, černé čaje a čaj Oolong. Ke kvantifikaci těchto sloučenin byla využita mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií. Mezi identifikovanými vonnými látkami byl stanoven benzylalkohol, linalool, geraniol a citral.

Pro objektivní stanovení komponent, které přispívají k charakteristické vůni zeleného čaje Sen-cha využili Kumazawa a Masuda [116] metodu analýzy ředěného extraktu vzorku (AEDA – *Aroma Extract Dilution Analysis*). Alikvotní podíly každé frakce byly poté analyzovány pomocí plynové chromatografie s hmotnostním detektorem. Zvolená metoda odhalila 36 silných odorantů, mezi kterými byl také identifikován linalool, geraniol, eugenol a kumarin. Vůně identifikovaných látek byly srovnány a stanoveny pomocí plynové

chromatografie s olfaktometrem a neznámé sloučeniny byly identifikovány pomocí multidimenzionální plynové chromatografie s hmotnostním detektorem.

Pripdeevech a Machan [117] se zabývali identifikací vonných látek v pěti druzích thajských čajů. Vonné látky byly extrahovány pomocí simultánní destilace a extrakce (SDE) a poté stanoveny GC-MS. Bylo identifikováno přes 55 těkavých sloučenin spolu s benzylalkoholem, linalolem, geraniolem, kumarinem, isoeugenolem, benzylbenzoátem a benzylsalicylátem.

Aromatické složení čaje Pu-ehr a sloučeniny odpovědné za výjimečnou chuť a vůni tohoto nápoje zkoumali čínští vědci Lv a kol. [118]. Těkavé sloučeniny byly extrahovány pomocí mikroextrakce tuhou fází a stanoveny GC-MS a GC-O. Mezi identifikovanými látkami figuroval také linalool, geraniol a citral.

Pellati a kol. [119] identifikovali a kvantifikovali 31 těkavých vonných komponent v ovoci *Evodia rutaecarpa* pomocí metody mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií (HS-SPME-GC-MS). Těkavé látky byly z headspace prostoru sbírány pomocí SPME vlákna se sorpční vrstvou z DVB/CAR/PDMS. Mezi identifikovanými sloučeninami dominovaly alergenní vonné látky a to zejména limonen, linalool, citronellol a geraniol.

Podrobnou analýzou a složením esenciálních olejů se zabývali Tabanca a kol. [120]. Esenciální oleje byly získány z různých částí rostliny rodu bedrník (*Pimpinella*) a poté analyzovány pomocí plynové chromatografie s plamenově ionizačním a hmotnostním detektorem. Bylo identifikováno přes sto sloučenin, přičemž mezi nimi byl stanoven pouze limonen, linalool, eugenol a farnesol.

Sproll a kol. [121] použili vysokoúčinnou kapalinovou chromatografii ve spojení s detektorem diodového pole (HPLC-DAD) pro stanovení přírodního kumarinu, který se vyskytuje v esenciálních olejích řady rostlin používaných jako chuťové přísady v potravinách. Potravin, které byly předmětem šetření, zahrnovaly pekárenské výrobky, snídaňové cereálie, likéry, vodku, svažené víno a mléčné produkty. Pevné vzorky potravin byly před analýzou upravovány extrakcí rozpouštědlem, kapalně mléčné vzorky byly naředěny metanolem a filtrovány a kapalně alkoholické nápoje byly přímo injektovány do HPLC systému.

Stejnou problematikou se také zabývali Raters a Matissek [122], kteří použili pro stanovení obsahu kumarinu v potravinách kapalinovou chromatografii ve spojení s tandemovým hmotnostním spektrometrem (LC-MS/MS) a porovnali tuto metodu s HPLC-UV.

Crupi a kol. [123] zkoumali kvalitativní a kvantitativní vlastnosti citrónového likéru „Limocella“ pomocí různých analytických technik. Pro extrakci těkavých látek bylo použito SPME vlákno s PDMS sorpční vrstvou, pro separaci a identifikaci analytů byla aplikována chirální GC, GC-FID, GC-MS a netěkavé frakce byly analyzovány kapalinovou chromatografií na obrácených fázích (RP-HPLC). V likéru bylo identifikováno 55 těkavých látek, mezi kterými byl zastoupen limonen, linalool, citral a geraniol.

Pino a Queris [124] se zabývali aromatickým profilem vína z manga. Těkavé sloučeniny byly izolovány pomocí nepřetržité extrakce rozpouštědlem a poté analyzovány GC-FID a GC-MS. Celkem bylo identifikováno a kvantifikováno 102 těkavých složek, které obsahovaly limonen, farnesol, linalool a benzylbenzoát.

Stanovením terpenů v alkoholickém nápoji tequila se zabývali Peña-Alvarez a kol. [125]. Pomocí mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií bylo analyzováno 18 různých obchodních značek nápojů tequila, ve kterých bylo kvantifikováno sedm terpenů zahrnující linalool, eugenol, citronellol a farnesol.

Bianchi a kol. [126] ve své studii sledovali změny v aromatickém těkavém profilu okvětních plátků růží používaných jako přísada do nových potravinářských produktů. Zvolená metoda HS-SPME-GC (PDMS-DVB stacionární vrstva vlákna) byla aplikována na surové a tepelně zpracované okvětní plátky anglických růží a také na jogurt s přísadou upravených plátků růží. Všechny vzorky byly podrobeny senzorické analýze, při které byla vyhodnocována charakteristika detekované vůně a její intenzita. Pro výzkum byla použita vonná směs 18-ti látek zahrnující také alergenní látky limonen, citronellol, citral, geraniol, eugenol a farnesol.

Výzkumem vonných látek esenciálních olejů ze sušených plodů černého pepře a pepře guinejského z Kamerunu se zabývali Jirovetz a kol. [127]. K identifikaci vonných komponent odpovědných za charakteristické aroma tohoto koření byla použita metoda SPME (DVB/CAR/PDMS sorpční vrstva vlákna) ve spojení s GC-FID a GC-MS. Bylo stanoveno 100 vonných komponent, které byly také charakterizovány olfaktometricky a mezi kterými figuroval limonen, linalool, citronellol, eugenol, farnesol a benzylbenzoát.

Mikroextrakci tuhou fází v kombinaci s GC-MS využili také Wong a kol. [128]. Předmětem jejich studie bylo charakterizovat a kvantifikovat 33 vonných látek uvolňujících se ze žvýkačky. Mezi těmito látkami byly také limonen, linalool, geraniol, benzylcinnamát. Instrumentální analýza byla srovnána s matematickým modelováním rychlostních konstant související jak s kinetikou uvolňování zmíněných aromat ze žvýkačky do *headspace* prostoru, tak s kinetikou jejich adsorpce na SPME vlákno.

Jednou z nejvíce používaných aromatických přísad v potravinách a nápojích je vanilkový extrakt. Vzhledem k vysoké ceně autentického vanilkového extraktu jsou často používány umělé vanilkové příchutě. Někteří výrobci pančují vanilkové extrakty kumarinem, aby se zvýšila percepce vanilkové příchuti. Otázkou pančování vanilkových produktů se zabývali Jager a kol. [129], jejichž cílem bylo ve vybraných produktech stanovit pomocí kapalinové chromatografie s hmotnostní detekcí a UV detekcí vanilín, etylvanilín a kumarin. Později využil stejný tým vědců [130] na stanovení těchto sloučenin ve vanilkových produktech metodu SPME-GC/MS. Výsledky získané touto metodou byly srovnány s výsledky prezentovanými v předchozí studii.

Aromatická aditiva se také nacházejí v cigaretovém tabáku a zahrnují jednotlivě přidané sloučeniny (přírodní a syntetické) a botanické preparáty (extrakty, esenciální oleje, koření), které dodávají organoleptické vlastnosti jak tabáku, tak tabákovému kouři. Touto problematikou se zabývali Stanfill a Ashley [131], kteří využili metodu SPME-GC/MS pro stanovení vonných látek v nejprodávanějších amerických cigaretách. Bylo kvantifikováno 12 aromatických aditiv, mezi nimi také eugenol, isoeugenol a kumarin.

2.11 Senzorické hodnocení chuti a/nebo vůně (flavouru)

Senzorická analýza (senzorické hodnocení) je nejčastěji definována jako analytická metoda, při níž se senzorické (dříve tzv. organoleptické) vlastnosti stanoví výhradně pomocí lidských smyslů. Senzorická kvalita není tvořena jednou vlastností, ale je složena z mnoha znaků vnímaných samostatně lidskými smysly. Jednotlivé vjemy jsou pak spojeny v mozků v celkový a komplexní dojem kvality [132].

Osoby, které vykonávají senzorickou analýzu, se nazývají posuzovatelé nebo hodnotitelé, mezinárodním termínem *asesoři*. Pro dosažení kvalitních výsledků má soubor hodnotitelů (senzorický panel) rozhodující význam a vybírá se vždy podle účelu, kterého chceme senzorickým hodnocením dosáhnout [133].

Pro provádění sensorického hodnocení je vypracována řada metod. Jejich cílem je na základě subjektivních názorů jednotlivých posuzovatelů získat objektivní informace o vzorcích. Proto jsou metody vždy prováděné skupinou posuzovatelů a výsledky jsou zpracovány statisticky. Značná část metod je normalizovaná, tj. jejich průběh a požadavky stanovují ČSN. Metody používané při sensorickém hodnocení lze obecně rozdělit na dva základní typy: jednodušší jsou tzv. rozlišovací zkoušky, používané ke stanovení rozdílu mezi předkládanými vzorky, a složitější tzv. deskriptivní (popisné) zkoušky, používané k identifikaci, příp. i kvantifikaci jednotlivých sensorických znaků přítomných ve vzorku [134].

Z širokého spektra metod, které lze použít, pro hodnocení sensorických vlastností vzorků v experimentální části této práce byl použit profilový test (ČSN EN ISO 13299) a hodnocení podle sedmibodové kategorové ordinální stupnice intenzitního a hédonického typu (ČSN ISO 4121). Vzhledem k tomu, že se práce věnuje stanovení vonných látek, pozornost je zaměřena především na sledování celkové chuti a/nebo vůně a vybraných deskriptorů, které mohou být v souvislosti s obsahem sledovaných vonných látek.

Zkoušky s použitím stupnic jsou v praxi nejrozšířenější. Jsou jednoduché, srozumitelné a lze jimi nejlépe kvantitativně vyjádřit rozdíly mezi vzorky. Pojem stupnice lze obecně definovat jako „kontinuum, rozdělené do po sobě jdoucích hodnot (bodů, kategorií, stupňů apod.)“. V sensorické analýze se používá k vyjádření úrovně sledované vlastnosti [132, 134]. ČSN ISO 4121 definuje **odpovědní stupnici** jako „stupnici, pomocí které posuzovatel zaznamenává kvantitativní odpověď“ a **měřítka stupnice** jako „formální vztah mezi vlastností a čísly používanými k znázornění hodnot vlastnosti“. Existuje mnoho různých typů stupnic, při výběru je potřeba brát v úvahu cíl hodnocení, typ výrobku a kvalitu sensorického panelu, který máme k dispozici. Nejčastěji se v sensorické analýze používají stupnice **ordinální**, které ČSN ISO 4121 definuje jako „stupnice, ve které je pořadí hodnot určené pořadím intenzit vnímané vlastnosti, která je hodnocena“. Je potřeba zmínit, že u těchto stupnic velikost intervalů (vzdálenost mezi sousedními stupni) není přesně kvantifikována a není nutně stejná [132, 134].

Senzorický profil patří mezi deskriptivní metody a je založen na představě, že sensorický dojem ze vzorku se skládá z počtu identifikovatelných dílčích sensorických vlastností, tzv. deskriptorů, kde každá z nich je přítomna ve vyšším nebo nižším stupni. Seznam odpovídajících deskriptorů, každý s hodnotou intenzity, je sensorický profil. Obvykle jsou vlastnosti řazeny v pořadí vnímání [132, 134]. ČSN EN ISO 13299 definuje sensorický profil jako „popis sensorických vlastností vzorku sestávající ze sensorických vlastností v pořadí jak jsou vnímány a s přiřazenými hodnotami intenzit pro každou vlastnost“.

Jde o vysoce sofistikovanou metodu, pomocí níž lze provést důkladnou, hloubkovou sensorickou analýzu různých vzorků. Kompletní vyjádření profilu je velmi složité a náročné na čas, je zapotřebí sledovat velmi mnoho parametrů (pro některé potraviny existují seznamy až se 150 dílčími vjemy), proto se většinou stanovují profily jen určité vlastnosti. ČSN EN ISO 13299 definuje **částečný sensorický profil** jako „profil obsahující jisté vybrané vlastnosti, s jejich hodnotami intenzit“. V rámci této práce jsme se zaměřili na hodnocení sensorického profilu flavouru.

Flavour bývá nejčastěji definován jako sensorický vjem, zahrnující kombinaci chuti, vůně, pocitu bolesti, tepla a chladu a taktilních pocitků v ústní a nosní dutině [134]. ČSN EN ISO

5492 definuje flavour jako „celkovou kombinaci čichového, chuťového a trigeminálního vjemu vnímaného během zkoušení“. Za hlavní složku flavouru je považována vůně (aroma), která se na celkovém vjemu podílí cca ze 70–85 % [132, 133]. Pro označení změněné, nepřirozené vůně a/nebo chuti v důsledku nejrůznějších vlivů se nejčastěji používá anglický termín *off-flavour*, příp. české termíny cizí chuť a vůně, přípach, pachut' apod. [132, 133].

V současné době se ukazuje, že v mnoha případech ani kvantitativní popis deskriptorů není postačující a je věnována stále větší pozornost dynamice procesu vnímání flavouru. Je nesporné, že flavour se během konzumace sousta mění. Vonné a chuťové látky mají často různé fyzikálně-chemické vlastnosti, což ovlivňuje jejich uvolňování z potraviny během konzumace, která trvá cca 15-25 s, a proto přispívají k flavouru následně [135, 136]. Postupné těkání vonných látek je významným faktorem i při hodnocení kosmetických produktů (parfémů, kolínských vod ap.). Za tímto účelem byly vyvinuty tzv. metody hodnocení časového vývoje, kde se intenzita daného vjemu hodnotí v určitých časových intervalech (např. 5ti, 10ti nebo 20ti sekundových) [132, 134]. ČSN EN ISO 13299 definuje *senzorický profil doznívání* jako „profil, který posuzuje intenzitu dané vlastnosti tak, jak se mění v čase, sledující jednu vlastnost podnětu“.

Senzorickému hodnocení flavouru různých typů potravin a kosmetických výrobků se věnuje velká řada publikací, často v kombinaci se stanovením vonných a/nebo chuťových látek, jak bylo nedávno shrnuto v přehledném článku Chamberse a Koppela [137] nebo Pense-Lheritierové [138]. Prakticky výhradně jsou aplikovány různé typy deskriptivních senzoričeských metod.

Z produktů sledovaných v této práci lze zmínit např. publikace Lee a Chambersové [139-141], Alasalvara a kol. [142] nebo Lee a kol. [143], kteří se věnovali hodnocení černých a zelených čajů; Ott a kol. [144], Gonzalez a kol. [145], Loures a kol. [146] nebo Saint-Eve a kol. [136] hodnocení jogurtů s různými ovocnými příchutěmi. Další autoři hodnotili ovocné bonbóny [147], různé alkoholické [148] a/nebo nealkoholické ochucené nápoje [149, 150]. Ovejero-Lopez a kol. [151] ve své práci sledovali časový vývoj flavouru žvýkacích gum během žvýkání. Z kosmetických produktů např. Troccaz a kol. [152] hodnotili ústní vody, Hightower a Chambers [153] zubní pasty, Goncalves a kol. [154] gelové a krémové kosmetické přípravky aj. Cílem uvedených studií bylo většinou sledování různých závislostí senzoričeských a instrumentálních charakteristik za účelem zlepšení celkové senzoričeské kvality výrobku a její zachování bez ohledu na použité podmínky zpracování a skladování.

3 CÍLE DIZERTAČNÍ PRÁCE

Hlavním cílem této disertační práce bylo vyvinout analytickou metodu vhodnou pro stanovení těkavých vonných látek v různých typech biologických maticí. Pozornost je zaměřena na stanovení konkrétních 24 nejvýznamnějších, legislativně ošetřených, vonných látek s alergenními účinky.

Dílčí cíle práce:

1. na základě literární rešerše výběr analytické metody vhodné pro stanovení těkavých vonných látek
2. optimalizace experimentálních podmínek metody pro stanovení konkrétních vonných látek s alergenními účinky
3. validace vybrané metody (linearita, opakovatelnost, reprodukovatelnost, limity detekce a kvantifikace, robustnost, výtěžnost)
4. aplikace optimalizované a validované metody na širokou škálu reálných vzorků zahrnující aromatizované potraviny, kosmetické prostředky a hračky
5. vyhodnocení obsahu sledovaných látek ve vzorcích
 - srovnání s informacemi na obalu
 - srovnání s příslušnými legislativními požadavky
 - vyhodnocení možných negativních účinků na zdraví uživatelů
6. senzorické hodnocení (především chuti a/nebo vůně) vzorků pomocí profilových testů

4 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

Podstatou experimentální části bylo vypracovat metodiku pro stanovení nejvýznamnějších, legislativně ošetřených alergenních vonných látek. U vybrané SPME-GC-FID metody byly stanoveny optimální extrakční podmínky a následně byl celý proces validován. Poté byla výše zmíněná metoda aplikována na řadu reálných vzorků a získané výsledky byly srovnány s údaji na etiketě. Analyzované vzorky byly následně podrobeny senzoričkému hodnocení sledujícímu především chuť a/nebo vůni.

4.1 Laboratorní vybavení

4.1.1 Chemikálie

Pro stanovení alergenních vonných látek byly použity následující standardy, všechny v čistotě p.a.: 2-(fenylmetylen)-heptanal, 97% (amylcinnamal); fenylmethanol, 99% (benzylalkohol); 3-fenyl-2-propen-1-ol, 98% (cinnamylalkohol); 3,7-dimethylocta-2,6-dienal, 95% (citral, cis/trans); 2-methoxy-4-prop-2-enyl fenol, 99% (eugenol); 7-hydroxy-3,7-dimethyloktanal, $\geq 95\%$ (hydroxycitronellal); 2-methoxy-4-(1-propenyl) fenol, 98% (isoeugenol, cis/trans); 2-(fenylmetylen)-1-heptanol, $\geq 85\%$ (amylcinnamylalkohol); 2-hydroxy-fenylmethyl ester kyseliny benzoové, 99% (benzylsalicylát); 3-fenyl-2-propenal, $\geq 93\%$ (cinnamal); 2H-1-benzopyran-2-one, 98% (kumarin); 3,7-dimethyl-2,6-oktadien-1-ol, 97% (geraniol); 4-(4-hydroxy-4-methylpentyl)cyklohex-3-ene-1-karbaldehyd, 97% (lyral); 4-methoxybenzylalkohol, 98% (anisalkohol); 3-fenyl-fenylmethyl ester-2-propenové kyseliny, 99% (benzylcinnamát); 3,7,11-trimethyl-2,6,10-dodekatrien-1-ol, 95% (farnesol); 2-(4-tert-butylfenyl)-2-methylpropanal, 95% (lilal); 3,7-dimethyl-1,6-oktadien-3-ol, 97% (linalool); fenylmethyl benzoát, 99% (benzylbenzoát); 3,7-dimethyl-1,6-oktadien-3-ol, 96% (citronellool); 2-(fenylmetylen) oktanal, 95% (hexylcinnamal); 1-methyl-4-prop-1-en-2-yl-cyklohexen, 97% ((R)-(+)-limonene); methyl ester 2-octynoic acid, 99% (methyl 2-oktynoát); 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-one, $\geq 85\%$ (isomethyl ionon). Všechny výše uvedené chemické látky byly zakoupeny ve společnosti Sigma-Aldrich (Německo).

Jednotlivé zásobní roztoky standardů byly připravovány v methanolu $\geq 99,8\%$ (Sigma-Aldrich (Německo)).

4.1.2 Přístroje a pomůcky

Analýzy byly realizovány pomocí plynového chromatografu TRACE GC (TeramoQuest, Itálie) s plamenově ionizačním detektorem a split/splitless injektorem. Separace byla provedena na kapilární koloně DB-WAX o rozměrech 30 m \times 0,32 mm \times 0,5 μ m (J. & W. Scientific, USA) a s teplotním limitem od 20 °C do 240 °C (250 °C).

Pro výběr vhodného SPME vlákna byly využity následující typy: PDMS/DVB 65 μ m; DVB/CAR/PDMS 50/30 μ m; CARTM/PDMS 85 μ m; PA 85 μ m; PDMS 100 μ m (Supelco, USA).

Bylo využito běžné laboratorní sklo Simax (Kavalier, ČR); vialky o objemu 4 ml, šroubovací uzávěry, septa; automatické pipety 0,5–10 μ l, 10–100 μ l, 100–1000 μ l (Biohit Proline, Finsko); vodní lázeň (Julabo TW2, Německo); analytické digitální váhy (Helago, Itálie) a nádobí a pomůcky pro senzoričkovou analýzu.

4.2 Seznam vzorků použitých k analýze

Celkem bylo analyzováno 82 komerčně dostupných, náhodně vybraných vzorků, 34 kosmetických výrobků (5 vzorků zubních past pro děti, ústní voda, 4 vzorky pleťových vod, 3 druhy pleťových krémů, pleťová maska, balzám na rty, 2 vzorky dětských olejů, 4 vzorky dětských krémů, 2 druhy vod po holení, 2 vzorky tělové kosmetiky, 2 vzorky krémů na ruce, antiperspirant pro ženy, deodorant pro muže, 4 vzorky sprchových gelů, šampón na vlasy), 3 vzorky avivážních prostředků, 42 vzorků různých potravin (10 druhů sypaných čajových směsí, 6 druhů čajových směsí porcovaných, 10 druhů želatinových bonbónů, 5 druhů žvýkacích gum, 11 druhů alkoholických a nealkoholických nápojů) a 3 druhy dětských hraček, zakoupených v běžné tržní síti. Vzorky byly skladovány za podmínek uvedených na obalu až do doby analýzy. Všechny analyzované vzorky s údaji uvedenými na etiketě týkající se vonných látek jsou prezentovány v *Tabulkách 3-12*. Pro zachování anonymity distributora jsou testované vzorky zakódovány.

Tabulka 3 Seznam analyzovaných kosmetických přípravků (KP) určených k ústní hygieně

Kosmetický přípravek	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
Zubní pasta Z1	Aroma, Cinnamal, Eugenol, Limonen	Polsko
Zubní pasta Z2	Aroma	Česká republika
Zubní pasta Z3	Aroma	Velká Británie
Zubní pasta Z4	Aroma, Limonen, Benzylalkohol	Německo
Zubní pasta Z5	Aroma, Benzylalkohol, Limonen	Francie
Ústní voda Z6	Aroma	Velká Británie

Tabulka 4 Seznam analyzovaných KP určených k péči o pleť

Kosmetický přípravek	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
Olivová pleťová voda K1	Parfum, Benzylalkohol, Butylphenyl Methylpropional, Linalool, Citronellol, Limonen, Benzylsalicylát, Eugenol	Německo
Jemná pleťová voda K2	Parfum, Hydroxyisohexyl 3-cyklohexen karboxaldehyd, Butylphenyl Methylpropional, α -Isomethyl ionon	Francie
Pleťová voda vyživující K3	Parfum, Cinnamylalkohol, Hydroxycitronellal, Kumarin, Geraniol, Hydroxyisohexyl 3-cyklohexen karboxaldehyd, Benzylbenzoát, Citronellol, α -Isomethyl ionon,	Česká republika
Vyhlazující pleťová voda K4	Parfum/Fragrance, Limonen, Linalool, Benzylsalicylát, Benzylalkohol, Geraniol, α -Isomethyl ionon, Citronellol, Kumarin	Francie
Přírodní olivový krém K5	Fragrance, Linalool, Citronellol, Hexylcinnamal, Geraniol, Benzylsalicylát, Benzylalkohol, Citral, Amylcinnamal, Limonen, Hydroxycitronellal, Cinnamylalkohol	Polsko

Tabulka 4 Seznam analyzovaných KP určených k péči o pleť - pokračování

Kozí mléko, denní krém K6	<i>Fragrance</i> , Linalool, Butylphenyl Methylpropional, Citronellol, Hexylcinnamal, Geraniol, Eugenol, Benzylsalicylát, α -Isomethyl ionon, Kumarin, Limonen	Polsko
Výživný krém K7	<i>Parfum</i> , Amylcinnamal, Eugenol, Hydroxycitronellal, Kumarin, Citronellol, Butylphenyl Methylpropional, Hexylcinnamal, α -Isomethyl ionon	Česká republika
Dětský ochranný krém K8	<i>Parfum</i>	Česká republika
Balzám na rty K9	<i>Aroma</i> , Limonen	Čína
Pleťová maska čistící K10	<i>Parfum</i> , Limonen, Citral, Geraniol	Česká republika
Kolínská voda K11	<i>Parfum</i> , Amylcinnamal, Linalool, Citral, Hydroxycitronellal, Citronellol, Benzylalkohol, Benzylbenzoát, Benzylcinnamát, Cinnamal, Kumarin, Eugenol, Geraniol, Limonen, α -Isomethyl ionon	Česká republika
Voda po holení K12	<i>Parfum</i> , Amyl cinnamal, Benzylalkohol, Benzylbenzoát, Benzylcinnamát, Citral, Citronellol, Kumarin, Geraniol, Limonen, Linalool, α -Isomethyl ionon	Česká republika

Tabulka 5 Seznam analyzovaných KP určených k péči o tělo

Kosmetický přípravek	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
Tělové máslo K13	<i>Parfum</i> , Kumarin, α -Isomethyl ionon	Čína
Tělové mléko K14	<i>Parfum</i> , Citral, Limonen, Lilial, Linalool, Hexylcinnamal, Citronellol	Česká republika
Sprchový gel K15	<i>Parfum</i> , Benzylalkohol, Butylphenyl Methylpropional, Citronellol, Hexylcinnamal, Limonen, Linalool	Německo
Sprchový gel K16	<i>Parfum</i> , Benzylalkohol, Butylphenyl Methylpropional, Hexylcinnamal, Hydroxycitronellal, Hydroxyisohexyl 3-cyklohexen karboxaldehyd, Linalool, Limonen, α -Isomethyl ionon	Česká republika
Sprchový gel K17	<i>Parfum/Fragrance</i> , Hexylcinnamal, Linalool, Citronellol, Kumarin	Španělsko
Sprchový gel K18	<i>Parfum</i> , Linalool, Limonen, Citronellol, Citral	Německo

Tabulka 5 Seznam analyzovaných KP určených k péči o tělo - pokračování

Šampón revitalizační K19	Parfum, Limonen, Linalool, Citral, Hexylcinnamal	Francie
Antiperspirant pro ženy K20	Parfum, α -Isomethyl ionon, Benzylalkohol, Benzylsalicylát, Citral, Kumarin, Hexylcinnamal, Limonen, Linalool	Rusko
Deodorant pro muže K21	Parfum, α -Isomethyl ionon, Benzylalkohol, Benzylbenzoát, Benzylsalicylát, Butylphenyl Methylpropional, Citral, Citronellol, Eugenol, Geraniol, Hexylcinnamal, Hydroxyisohexyl 3- cyklohexen karboxaldehyd, Limonen, Linalool,	Česká republika
Krém na ruce K22	α -Isomethyl ionon, Benzylalkohol, Butylphenyl Methylpropional, Citronellol, Kumarin, Geraniol, Hexylcinnamal, Limonen, Linalool, Hydroxyisohexyl 3-cyklohexen karboxaldehyd	Německo
Krém na ruce K23	Parfum, Butylphenyl Methylpropional, Linalool, Citronellol, Limonen, Benzylsalicylát, Eugenol	Německo
Dětský olej K24	Parfum, Lilial, Hydroxycitronellal, Limonen, Linalool, Benzylbenzoát, Citronellol, Kumarin, Geraniol, α -Isomethyl ionon	Česká republika
Dětský olej K25	Parfum	Německo
Dětské tělové mléko K26	Parfum, Linalool, Limonen, Kumarin, Citronellol, Hexylcinnamal, Benzylalkohol	Německo
Dětský krém K27	Parfum, Benzylalkohol, Kumarin, Citronellol Hydroxyisohexyl 3-cyklohexen karboxaldehyd, Linalool, Hexylcinnamal, Cinnamal, Geraniol,	Česká republika
Dětská mast K28	Parfum, Amyl cinnamal, Benzylbenzoát, Benzylsalicylát, Citronellol, Kumarin, Eugenol, Geraniol, Hydroxycitronellol, Isoeugenol, Limonen, Linalool	Česká republika

Tabulka 6 Seznam analyzovaných avivážních prostředků

Kód aviváže	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
D1	Parfum, α -Isomethyl ionon, Amylcinnamal, Butylphenyl Methylpropional, Citronellol, Kumarin, Hexylcinnamal, Limonen, Linalool	Belgie
D2	Parfum, Benzylsalicylát, Butylphenyl Methylpropional, Kumarin, Hexylcinnamal, Linalool	Rakousko
D3	Parfum, α -Isomethyl ionon, Benzylbenzoát, Hexylcinnamal, Linalool	Belgie

Tabulka 7 Seznam analyzovaných sypaných čajových směsí

Kód čajové směsi	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
S1	Pravý černý čaj, rozinky, kousky pomerančové kůry (min. 6,9 %), plátky mandlí, kousky bílé čokolády, aroma amaretta (min. 1,9 %), aroma, květy šafránu	Vietnam
S2	Slupky šípku, kousky jablek, ibišek, guarana (min. 15 %), listy ostružníku a meduňky, vousatka citrónová, aroma	Česká republika
S3	Mate (min. 82 %), kousky papáji, aroma, plody Goji, kousky malin, kousky divizny, listy ginkga, kousky santalového dřeva, květy chrpy	Brazílie
S4	Pražené mate (min. 68,2 %), kousky zázvoru, aroma, plátky pomeranče, bílý pepř, plody Goji, červený pepř, květy pivoňky, kousky santalového dřeva, chilli papričky, květy bodláku a slunečnice	Brazílie
S5	Černý čaj Pu-Ehr (min. 85,2 %), šípkové oplodí, kousky jablka, zelené mate, aroma, vousatka citrónová	Čína
S6	Rooibos (min. 76,2 %), kousky pomerančové kůry (min. 5,7 %) a papáje, aroma, červený pepř, kousky santalového dřeva, zázvoru (min. 1,9 %) a ženšenu, květy pomerančovníku, chrpy a levandule	Jihoafrická republika
S7	Rooibos (min. 79,9 %), kousky citrónové kůry, aroma, kousky skořice (min. 3,1 %)	Jihoafrická republika
S8	Rooibos (min. 81,9 %), rakytník řešetlákový (min. 10,2 %), aroma, květy slunečnice a bodláku	Jihoafrická republika
S9	Černý čaj, květy růže (min. 3 %), rozinky, kousky meruňky a manga, aroma	Čína
S10	Pravý černý čaj, plátky citrónu, vousatka citronová, přírodní aroma, kousky zázvoru, pepř bílý, květy kaktusu, červený pepř, kousky santalového dřeva, listy Aloe, květy bodláku	Vietnam

Tabulka 8 Seznam analyzovaných čajových směsí porcovaných

Kód čajové směsi	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
P1	jablko 29 %, ibišek 28 %, švestky 17 %, černý rybíz 13 %, ostružiny 10 %, ovocné aroma 3 %	Polsko
P2	přírodní aroma	Švýcarsko
P3	ibišek, jablko, černý rybíz, švestka, aroma	Polsko
P4	brusinkové, pomerančové, citrónové aroma	Česká republika
P5	přírodní citrónové aroma	Švýcarsko
P6	aroma	Švýcarsko

Tabulka 9 Seznam analyzovaných želatinových bonbónů

Kód želé bonbónu	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
B1	Jahodové aroma, extrakt černé mrkve	Česká republika
B2	Aroma, ovocné a zeleninové koncentráty (jablko, rajče, ředkev, dýně)	Nizozemsko
B3	Ovocné koncentráty 15% (jablečný, třešňový, jahodový, borůvkový, malinový), rostlinné koncentráty a extrakty (černá mrkev, mrkev, ibišek), aromata (jahodové, borůvkové, višňové, malinové)	Česká republika
B4	Aroma	Belgie
B5	Aroma	Belgie
B6	3% ovocná dřev (jablko), ovocná šťáva z koncentrátu ovocné šťávy (jahoda, malina), ovocné a zeleninové koncentráty (mrkev, jablko, kořen černé mrkve, dýně, borůvka, třešně, citrón, červené zelí), přírodní aroma	Německo
B7	Aroma (citrónové, pomerančové, jablečné, jahodové)	Polsko
B8	Jablečná šťáva z jablečného koncentrátu (6% hm.), výtažky z ovoce a zeleniny (citrón, saflor, hrozny, borůvky, jablko), brusinkový koncentrát, přírodní aroma, přírodní pomerančové aroma	Německo
B9	Aromata (tutti frutti, vanilka), extrakt světlice barvířské	Česká republika
B10	Aroma	Rakousko

Tabulka 10 Seznam analyzovaných ovocných žvýkacích gum

Kód žvýkací gumy	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
G1	Aroma, ovocné šťávy 3% (kiwi, ostružina, jahoda)	Turecko
G2	Aroma	Polsko
G3	Aroma	Velká Británie
G4	Aroma	Německo
G5	Aroma	Německo

Tabulka 11 Seznam analyzovaných alkoholických a nealkoholických nápojů

Kód nápoje	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
N1	Hruškový koncentrát, aroma	Česká republika
N2	Aroma	Česká republika
N3	Přírodní višňová šťáva z koncentrátu, přírodní aromatický přípravek, aroma	Slovenská republika
N4	Aroma	Česká republika

Tabulka 11 Seznam analyzovaných alkoholických a nealkoholických nápojů - pokračování

N5	Aroma	Česká republika
N6	Jablečné a citrónové přírodní aroma	Česká republika
N7	Jablečná šťáva (21% hm.) z jablečného koncentrátu, broskvová šťáva (3,3% hm.) z broskvového koncentrátu, aroma	Polsko
N8	Koncentrát z jahodové šťávy (12 %), aroma (přírodní), šťáva z černého rybízu	Maďarsko
N9	Aroma	Rakousko
N10	Pomerančová šťáva (1,7% z pomerančového koncentrátu), aroma	Rakousko
N11	Aroma	Rakousko

Tabulka 12 Seznam analyzovaných dětských hraček

Kód dětské hračky	Údaje uvedené na etiketě	Země původu
H1	„Scented“	Čína
H2	„fragrance/parfum“	Čína
H3	„Parfum“	Čína

4.3 Stanovení alergenních vonných látek metodou SPME-GC-FID

4.3.1 Postup při vzorkování a desorpci analytů

Do vialky o objemu 4 ml byl naředěn standard popř. směs všech standardů v příslušném poměru s rozpouštědlem. Celkový objem roztoku činil vždy 1 ml. Hermeticky uzavřená vialka byla umístěna do vodní lázně (40 °C) po dobu 15 min. Po uplynutí této doby bylo do headspace prostoru nad vzorkem vsunuto SPME vlákno, doba extrakce 17 minut. Po ukončení extrakce bylo vlákno ihned přeneseno do injektoru plynového chromatografu, kde byly analyty tepelně desorbovány (250 °C, 10 min.) a vneseny proudem nosného plynu na kolonu. Prázdňá hermeticky uzavřená vialka byla využívána jako blank mezi jednotlivými analýzami, aby se předešlo carry-over efektu. Použité SPME vlákno CARTM/PDMS 85 µm (Supelco, USA).

Parametry byly předmětem optimalizace, uvedené hodnoty odpovídají optimálním (viz kapitola 5.2.7).

4.3.2 Identifikace standardů alergenních vonných látek

Retenční časy studovaných látek byly určeny pomocí vnějšího standardu. Každá standardní látka byla namíchána do jedné 4ml samostatné vialky. Koncentrace standardů byly rozdílné a pohybovaly se od 50 do 150 µg.ml⁻¹, protože volba koncentrace závisela na velikosti odezvy.

Identifikace jednotlivých vonných látek ve vzorku byla provedena na základě porovnání jejich retenčních časů s retenčními časy identických standardů analyzovaných za stejných experimentálních podmínek. Pro identifikaci alergenních vonných látek byly využity extrakční parametry převzaté z literatury [155] a následně byly tyto faktory postupně optimalizovány. Aplikované extrakční podmínky: SPME vlákno s polymerní vrstvou typu

CAR™/PDMS o tloušťce 85 µm, doba dosažení rovnováhy 20 min, doba extrakce 30 min, extrakční teplota 35 °C. Další postup práce je shodný s postupem uvedeným v kapitole 4.3.1.

4.3.3 Optimalizace extrakčních podmínek

Pro stanovení optimálních extrakčních podmínek byly proměřovány závislosti ploch píků na daném parametru jak pro jednotlivé alergenní standardy, tak pro směs všech studovaných látek. Směs standardů byla aplikována až na základě vyhodnocení významnosti zkoumaných extrakčních podmínek z důvodu simultánního stanovování v rálných vzorcích. Předmětem optimalizace metody byla inkubační doba, doba extrakce, teplota extrakce a doba desorpce.

Jednotlivé roztoky standardů alergenních látek o koncentracích 50 - 150 µg.ml⁻¹ byly připraveny v methanolu a převedeny do 4ml vialky. Při testování směsi alergenních látek byl pracovní roztok připraven vhodným ředěním jednotlivých zásobních roztoků standardních látek v metanolu, přičemž objem pracovních roztoků dosahoval vždy 1 ml.

Výchozí extrakční podmínky, které byly následně modifikovány, byly totožné jako v kapitole 4.3.2. K testování výše zmíněných parametrů bylo použito vlákno, které bylo vybráno z 5-ti druhů komerčně dostupných SPME vláken (PA 85 µm, PDMS 100 µm, PDMS/DVB 65 µm, DVB/CAR/PDMS 50/30 µm a CAR™/PDMS 85 µm), a to na základě nejvyššího výtěžku získaného při extrakci vonných alergenů ve směsi. Pracovní roztoky obsahující 24 studovaných látek byly připraveny ředěním zásobních roztoků standardů (10-60 µl) v methanolu a měřeny za podmínek uvedených v kapitole 4.3.2.

4.3.4 Optimální podmínky SPME-GC-FID analýzy

Pro SPME extrakci bylo použito vlákno CAR™/PDMS 85 µm (Supelco, USA). Dosažení rovnováhy 15 min., extrakce 17 min. při 40 °C. Desorpce 10 min. při 250°C.

GC analýza byla provedena na přístroji TRACE™ GC (ThermoQuest, Itálie) vybaveném FID detektorem a kapilární kolonou DB – WAX (30 m x 0,32 mm x 0,5 µm). Splitless injektor 250 °C uzavřen 5 minut. Nosný plyn N₂ průtok 0,9 ml.min⁻¹. FID detektor 220 °C, průtok H₂ 35 ml.min⁻¹, vzduch 350 ml.min⁻¹, make-up N₂ 30 ml.min⁻¹. Teplotní program: 40 °C 1 min., vzestupný gradient 5 °C . min⁻¹ do 220 °C, 28 min.

4.3.5 Stanovení opakovatelnosti a reprodukovatelnosti metody

Opakovatelnost je typ přesnosti vztahující se k měřením provedeným za opakovatelných podmínek. Analýzy se provádějí všechny najednou, na témže zařízení s touž obsluhou. Používá se proto označení přesnost v sérii. Tato analytická vlastnost charakterizuje metodu a preciznost jejího provedení v laboratoři [156].

Opakovatelnost byla vypočtena ze série 5 měření, která byla realizována v průběhu jednoho dne. Pro stanovení opakovatelnosti byly studované alergeny namíchány v methanolu v rozsahu koncentrací 50 - 150 µg.ml⁻¹.

Na rozdíl od opakovatelnosti se reprodukovatelnost stanovuje postupně, např. jednou denně, na témže zařízení, případně i různými pracovníky. Tím je charakterizována stabilita metody a jejího provádění během celé doby používání. Jedná se o přesnost v čase [156].

Pro vyhodnocení reprodukovatelnosti byl připraven standardní roztok obsahující směs všech 24 alergenů. Roztok byl měřen pětikrát v rámci pěti různých dnů. Roztoky byly po každém měření uskladněny v lednici a připraveny na další analýzu.

Jednotlivé analýzy byly provedeny za optimalizovaných podmínek metody SPME-GC-FID (kapitola 4.3.4).

4.3.6 Stanovení linearitý metody

Pro stanovení linearitý bylo z každého standardu připraveno minimálně 5 roztoků o různých koncentracích s ekvidistantní vzdáleností. Jednotlivé koncentrace byly proměřeny třikrát ($n=3$) a vyneseny jako průměrná hodnota. Série roztoků byly analyzovány podle postupu v kapitole 4.3.1 a za dodržení stanovených extrakčních podmínek.

4.3.7 Stanovení mezí detekce a mezí stanovitelnosti

U separačních metod se používá k výpočtu meze detekce velikost hodnoty slepého pokusu, který byl prezentován prázdnou vialkou (4 ml). Další postup práce je shodný s postupem uvedeným v kapitole 4.3.1 za dodržení optimalizovaných extrakčních podmínek. Z chromatogramu slepého pokusu bylo poté určeno maximální kolísání základní linie (h_{max}) v oblasti dané 20-ti násobkem pološířky píku stanovovaného analytu. Odezva meze detekce y_D a meze stanovitelnosti y_S byla vypočítána podle vztahů (1) a (2) [157]:

$$y_D = 3 \cdot h_{max} \quad (1) \qquad y_S = 10 \cdot h_{max} \quad (2)$$

Koncentrace na mezi detekce x_D a na mezi stanovitelnosti x_S byly stanoveny:

$$x_D = \frac{y_D}{b_1} \quad (3) \qquad x_S = \frac{y_S}{b_1} \quad (4)$$

Směrnice kalibrační přímky b_1 byla odečtena ze závislosti výšky chromatografického píku na koncentraci daného analytu [157]. Analýzy probíhaly podle postupu uvedeného v kapitole 4.3.1 za dodržení optimalizovaných extrakčních podmínek.

4.3.8 Stanovení výtěžnosti

Výtěžnost byla stanovena aplikováním optimalizované metody na extrakci tří kosmetických přípravků (pleťová voda vyživující, olivová pleťová voda, kolínská voda).

Výtěžnost byla vypočítána jako podíl koncentrace získané rozdílem naměřených koncentrací ve spikovaném a nespikovaném vzorku a reálné koncentrace analytu přidané do vzorku podle vzorce (5) [91]. Vzorky byly analyzovány třikrát před a po přidavku.

$$R[\%] = \left(\frac{c_{sp} - c_{vz}}{c_{st}} \right) \cdot 100 \quad (5)$$

- c_{sp} koncentrace analytu ve vzorku s přidavkem standardu (obohacený vzorek)
- c_{vz} koncentrace analytu ve vzorku bez přidavku standardu
- c_{st} koncentrace přidávaného standardu do vzorku

4.3.9 Příprava reálného vzorku

Kapalné reálné vzorky o objemu 1 ml (kosmetické přípravky, nápoje, výluhy čajů) byly napipetovány přímo pomocí automatické pipety. Suspenzní vzorky (krémy, pasty) také o objemu 1 ml byly nadávkovány do vialky pomocí injekční stříkačky a vialka se vzorkem byla zvážena. V případě pevných matric (deodoranty, bonbóny, žvýkačky, sypané čaje, hračky) činilo množství vzorku 1 g. Pevné vzorky byly vhodným způsobem homogenizovány a podrobeny kvartování, na jehož základě byl vybrán reprezentativní podíl pro analýzu. Vzorky byly analyzovány metodou SPME-GC-FID, postupem uvedeným v kapitole 4.3.1 za optimalizovaných podmínek (viz kapitola 4.3.4), každý vzorek byl analyzován třikrát (n=3).

4.4 Senzorické hodnocení reálných vzorků

Senzorické hodnocení probíhalo ve specializované senzorické laboratoři vybavené v souladu s normou ČSN ISO 8589. Hodnotitelé byli vybráni z řad studentů fakulty chemické, kteří úspěšně absolvovali seminář senzorické analýzy a také úspěšně absolvovali základní senzorické zkoušky podle požadavků příslušných norem (ČSN ISO 5496; ČSN ISO 8586-1 a 2; ČSN ISO 3972). Hodnotitelé byli dále proškoleni z principů použitých senzorických zkoušek, jejich úroveň odpovídala definici „vybraný posuzovatel“ ve smyslu ČSN ISO 5492. Jednotlivých hodnocení se účastnilo 15-16 hodnotitelů.

V rámci senzorické analýzy byly hodnoceny všechny reálné vzorky analyzované metodou HS-SPME-GC-FID zahrnující ovocné a bylinné čaje, želatinové bonbony, alkoholické a nealkoholické nápoje, kosmetické prostředky. Pro senzorické hodnocení vzorků byl použit profilový test (ČSN EN ISO 13299) a hodnocení podle sedmibodové kategorové ordinální stupnice (ČSN ISO 4121). Pro zachování anonymity byly vzorky označeny třímístnými písmennými a číselnými kódy. Jako neutralizátor chuti byla podávána pitná voda nebo bílé pečivo.

Ukázky formulářů pro hodnocení jsou uvedeny v Příloze D-H.

4.4.1 Potraviny

Vzorky potravin byly rozděleny popř. nadávkovány do kódem označených skleněných kádinek, které byly poté zakryty malými Petriho miskami. Vzorky byly podávány v následujícím množství: želatinové bonbóny 3-4 kusy, kapalné vzorky nápojů v objemu 40 ml. Vzorky byly vždy podávány při laboratorní teplotě. Výjimku tvořily výluhy sypaných ovocných a bylinných čajů, které byly připraveny podle návodu na obalu a servírovány jako teplé nápoje (45 °C).

Nejprve byla hodnocena intenzita a příjemnost celkové chuti a vůně podle uvedených sedmibodových stupnic. Použitá intenzitní stupnice: 1 neznatelná ⇒ 7 velmi silná, použitá hédonická stupnice: 1 vynikající ⇒ 7 nepříjemná.

Dále byla pomocí profilového testu hodnocena intenzita 6 vybraných deskriptorů vůně: charakteristická, ovocná, sladká, kyselá, jiná-příjemná a jiná-nepříjemná vůně pomocí uvedené intenzitní stupnice; a 6 vybraných deskriptorů chuti: charakteristická, ovocná, sladká, kyselá, jiná-příjemná a jiná-nepříjemná chuť pomocí uvedené intenzitní stupnice.

Na závěr bylo provedeno hodnocení časového dozrívání příjemné a nepříjemné chuti (ČSN EN ISO 5492), za tímto účelem hodnotitelé hodnotili intenzitu chuti v určitých

časových intervalech (po 30 s, po 1 min., po 2 min. a po 3 min.), včetně kompletního popisu pocitu v ústech po 3 min.

4.4.2 Kosmetické přípravky

Kosmetické přípravky byly nadávkovány na kódem označené Petriho misky a dobře uzavřeny, protože doménou hodnocení byla vůně. Množství vzorku bylo zvoleno tak, aby bylo dostačující pro provedení všech senzorických zkoušek (20-40 g). Připravený vzorek byl před předložením jednotlivým hodnotitelům ponechán po dobu 15 minut při laboratorní teplotě, aby se dostatečně rozvinula vůně daného kosmetického přípravku.

Intenzita a příjemnost celkové vůně byla hodnocena podle uvedených sedmibodových stupnic. Použitá intenzitní stupnice: 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná, použitá hédonická stupnice: 1 neobyčejně příjemná \Rightarrow 7 nepříjemná.

Dále byla pomocí profilového testu hodnocena intenzita tří vybraných deskriptorů vůně: charakteristická, jiná-příjemná a jiná-nepříjemná vůně pomocí uvedené intenzitní stupnice.

Obdobným způsobem jako u potravin bylo hodnoceno i časové dozrívání vůně a na závěr měli hodnotitelé kompletně popsat celkově vnímanou vůni po 3 min.

V případě zubních past bylo provedeno i obdobné hodnocení chuti vzorků: intenzita a příjemnost celkové chuti a intenzita 6 vybraných deskriptorů chuti (charakteristická, ovocná, sladká, kyselá, jiná-příjemná a jiná-nepříjemná) podle výše uvedených stupnic.

Obdobným způsobem jako u vůně bylo provedeno hodnocení časového dozrívání příjemné a nepříjemné chuti, na závěr měli hodnotitelé kompletně popsat pocit v ústech po 3 min.

4.5 Statistické zpracování výsledků

Výsledky byly zpracovány pomocí softwaru MS Excel 2003 (Microsoft Corporation, USA) a statistického softwaru Unistat, v. 5.5. (Unistat, Velká Británie).

Výsledky SPME-GC-FID analýzy jsou uvedeny jako průměr a směrodatná odchylka (SD), každý vzorek byl proměřen třikrát ($n=3$). Výsledky jsou vyjádřeny v $\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ (resp. $\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$) vzorku. Pro srovnání obsahu sledovaných látek s legislativou stanovenými limity byl použit jednovýběrový Wilcoxonův test.

Výsledky senzorického hodnocení byly statisticky zpracovány Kruskal-Wallisovým testem a následně Nemenyiho vícenásobným párovým porovnáním a jsou vyjádřeny jako medián hodnocení všech hodnotitelů ($n=15$ popř. $n=16$).

Pro multivariační optimalizaci podmínek SPME extrakce metodou plánování experimentů (DOE) byl použit statistický software Statgraphics Centurion XVI (Statpoint technologies, Inc., USA).

Veškeré statistické testování bylo provedeno na hladině významnosti $\alpha = 0,05$.

5 VÝSLEDKY A DISKUZE

Hlavním cílem této disertační práce bylo vyvinout analytickou metodu vhodnou pro stanovení těkavých vonných látek v různých matricích. Pozornost je zaměřena na stanovení konkrétních 24 nejvýznamnějších, legislativně ošetřených, alergenních vonných látek (Příloha A), které jsou přidávány jak do potravin v podobě aromat pro zlepšení jejich chutnosti, tak do kosmetických přípravků za účelem zvýšení atraktivnosti výrobku nebo překrytí nežádoucího zápachu ostatních surovin.

Na základě studia dostupné literatury [105-107, 109, 119, 120, 124, 125] byla zvolena metoda založená na extrakci analytů pomocí headspace mikroextrakce tuhými fázemi ve spojení s plynovou chromatografií a plamenově ionizačním detektorem. Vývoj metody nejprve spočíval v identifikaci retenčních časů jednotlivých alergenních vonných látek. Poté byla tato metoda optimalizována, validována a následně aplikována na reálné vzorky pravděpodobně obsahující vonné alergeny. Analyzované vzorky byly zároveň použity na senzorické hodnocení chuti a/nebo vůně.

5.1 Identifikace alergenních vonných látek

Nejprve bylo nutné předběžně určit retenční časy sledovaných látek. Za tímto účelem byla použita metoda vnějšího standardu a byly aplikovány extrakční parametry převzaté z literatury [155] (viz. kapitola 4.3.2). Po optimalizaci parametrů metody byly definitivně stanoveny retenční časy všech sledovaných látek.

Identifikované retenční časy jednotlivých standardů za optimalizovaných podmínek analýzy jsou shrnuty v **Tabulce 13**. Chromatogram směsi standardů vonných alergenů je uveden v Příloze B.

Tabulka 13 Retenční časy studovaných alergenních látek

Označení píku	Alergenní látka	CAS	Retenční čas [min]
1	Limonen	5989-27-5	14,71
2	Amylcinnamylalkohol	101-85-9	20,91
3	Linalool	78-70-6	23,50
4	Methyl 2-oktynoát	111-12-6	26,14
5a	Citral 1	5392-40-5	27,05
5b	Citral 2		28,16
6	Citronellol	106-22-9	28,59
7	Geraniol	106-24-1	30,45
8	α -Isomethyl ionon	127-51-5	30,83
9	Benzylalkohol	100-51-6	31,27
10	Hydroxycitronellal	107-75-5	32,48
11	Lilial	80-54-6	34,69
12	Cinnamal	104-55-2	34,78
13	Eugenol	97-53-0	36,92
14a	Isoeugenol 1	97-54-1	38,70
15	Amylcinnamal	122-40-7	38,82

Tabulka 13 Retenční časy studovaných alergenních látek - pokračování

16	Anisalkohol	105-13-5	39,24
17	Cinnamylalkohol	104-54-1	39,37
18a	Farnesol 1	4602-84-0	39,69
18b	Farnesol 2		39,95
18c	Farnesol 3		40,65
14b	Isoeugenol 2	97-54-1	40,87
19	Hexylcinnamal	101-86-0	41,30
20a	Lylal 1	31906-04-4	44,32
21	Kumarin	91-64-5	44,59
20b	Lylal 2		44,80
22	Benzylbenzoát	120-51-4	51,17
23	Benzylsalicylát	118-58-1	60,22
24	Benzylcinnamát	103-41-3	63,52

Jak je patrné z **Tabulky 13** některé sledované alergenní látky jsou směsí cis/trans izomerů (citral = 2 izomery, isoeugenol = 2 izomery, farnesol = 3 izomery, lylal = 2 izomery). Citral se vyskytuje ve dvou izomerech, neralu a geranialu. Obchodní produkt citralu obsahuje vždy oba izomery, obvykle více geranialu než neralu v různých poměrech [158]. Isoeugenol se v přírodě vyskytuje v *cis*- a *trans*-formě. *Cis*-forma se nachází v absolutní karafiátové silici, *trans*-forma se nalézá v silici bazalkové [158]. Farnesol je směsí až 4 izomerů, ale v této studii byl k dispozici standard obsahující pouze tři izomery. Uvedené isomery se podařilo od sebe oddělit, v **Tabulce 13** a následně v celé práci jsou vždy označeny čísly 1-3.

5.2 Optimalizace extrakčních podmínek

Pro účely této práce byly poté optimalizovány podmínky SPME extrakce a desorpce s cílem dosáhnout co nejvyšší extrakční účinnosti během přijatelné doby. Studované analyty jsou tvořeny sloučeninami (alkoholy, aldehydy, estery, ethery a jedním laktone) s odlišnými fyzikálně-chemickými vlastnostmi, a proto je odpovídající optimalizace extrakčních podmínek nezbytná pro vývoj metody a pro simultánní extrakci všech analytů. Vzhledem k matici vzorku a těkavosti analytů byla vlákna lokalizována do plynné fáze nad vzorkem do tzv. headspace prostoru. Tento způsob extrakce se obecně používá pro těkavější sloučeniny, protože zkracuje dobu dosažení rovnováhy, zlepšuje selektivitu a prodlužuje životnost vlákna (asi 100-150 extrakcí) [74]. Další výhodou headspace extrakce je, že zabraňuje kontaminaci nebo rozkladu vrstvy SPME vlákna a snižuje vliv matrice [72, 159].

Účinnost SPME metody závisí na výběru vhodného typu vlákna, optimalizaci extrakčních a desorpčních podmínek. Extrakční teplota a čas jsou závislé na použitých vzorcích, zatímco účinnost desorpce vonných látek v injektoru je závislá na těkavosti, tloušťce vrstvy SPME vlákna, injekční teplotě a expoziční době [160].

Byly optimalizovány následující parametry: typ vlákna, doba dosažení rovnováhy, doba extrakce, teplota extrakce, doba desorpce. Vzhledem k počtu sledovaných proměnných, které mohou mít vliv na SPME metodu, byla nejprve provedena jednorozměrná analýza dat z důvodu lepšího prozkoumání chemického chování každé proměnné. V rámci tohoto testování byl sledován vliv jedné proměnné v čase, zatímco ostatní parametry zůstaly během experimentu neměnné.

V rámci optimalizace byly sledovány odezvy jak pro jednotlivé analyty, tak pro směs studovaných analytů, protože současné trendy v analytické chemii upřednostňují aplikace metod vhodných pro simultánní stanovení sledovaných látek.

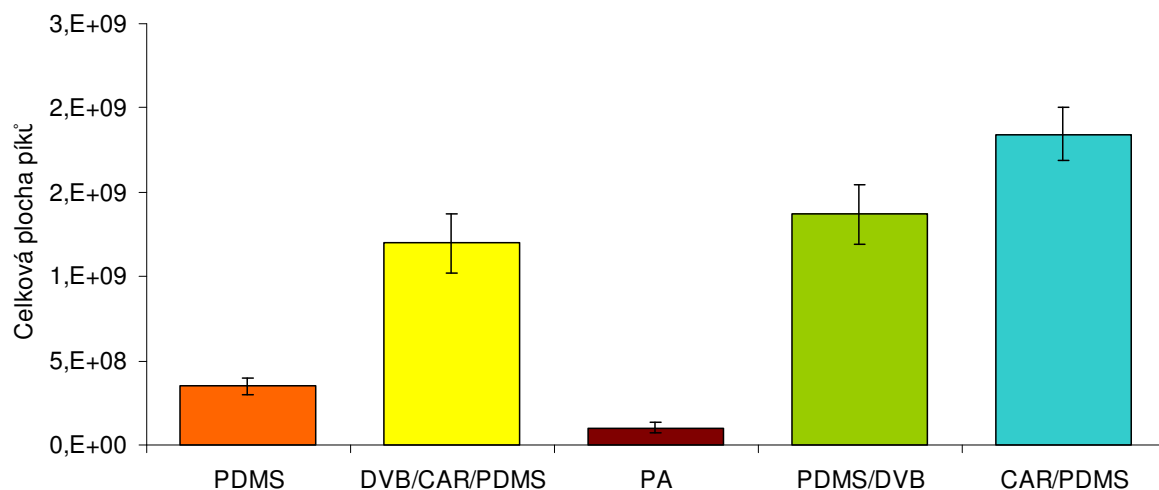
5.2.1 Výběr vhodného typu SPME vlákna

Vybrané alergenní látky patří do různých chemických skupin, které se liší fyzikálně-chemickými vlastnostmi, hydrofilními a lipofilními vlastnostmi a různou afinitou k polárnímu nebo nepolárnímu prostředí. Selektivitu a maximální výtěžek extrakčního procesu lze ovlivnit typem stacionární fáze pokrývající vlákno [74]. Vzhledem k uvedeným diferencím mezi analyty byl proveden předběžný screening 5-ti SPME vláken s různou stacionární fází a retenční schopností. Cílem bylo vybrat nejvhodnější typ vlákna z hlediska extrakční účinnosti a reprodukovatelnosti. Byla testována následující SPME vlákna: PA 85 μm - polární fáze; PDMS 100 μm - nepolární fáze; PDMS/DVB 65 μm , CARTM/PDMS 85 μm - bipolární fáze; DVB/CAR/PDMS 50/30 μm - bipolární fáze [69].

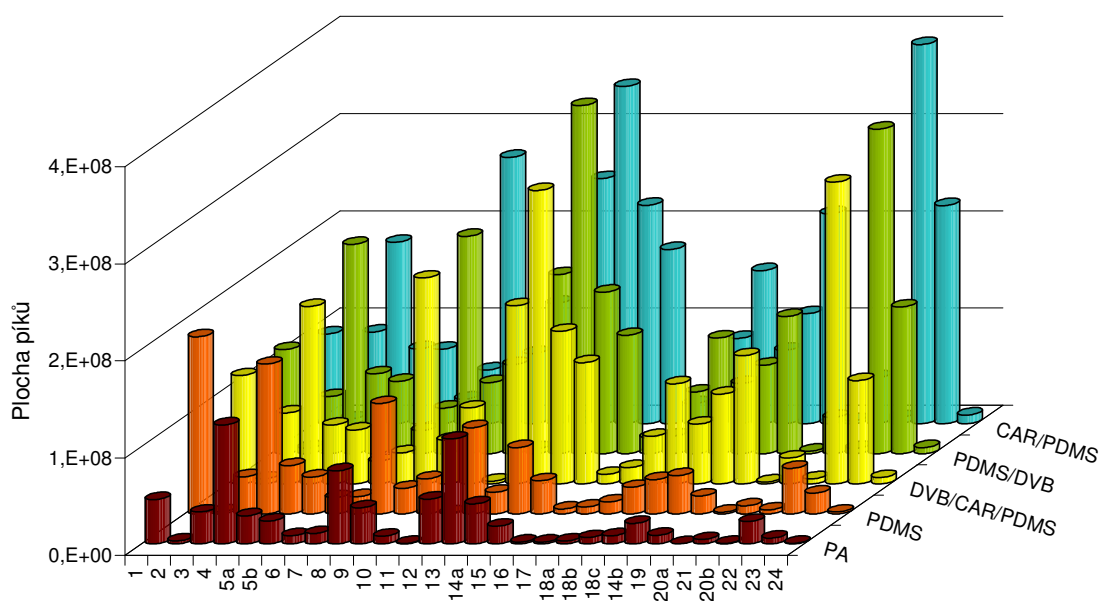
Každé vlákno bylo pětkrát exponováno v headspace prostoru nad roztokem standardů za stejných extrakčních podmínek. Pro tento přípravný screening vláken byly extrakční podmínky nastaveny opět podle literatury [155]: doba dosažení rovnováhy 20 min; extrakční čas 20 min; extrakční teplota 35 °C; doba desorpce 10 min. Uvedené parametry v této fázi nelze považovat za optimální, neboť optimální parametry se mohou lišit v závislosti na typu stacionární fáze. Účelem bylo pouze porovnat extrakční výtěžky za srovnatelných podmínek. Před prvním použitím byla všechna vlákna kondicionována podle doporučení výrobce.

Extrakční účinnost jednotlivých typů vláken byla vyjádřena jako suma ploch všech píků na chromatogramu (**Obrázek 2**) a jako plocha píků jednotlivých analytů (**Obrázek 3**). Z grafů je patrné, že nejvyšší výtěžky byly získány se středně polárním vláknem typu CAR/PDMS, i když v zásadě mohou být pro extrakci použita i vlákna DVB/CAR/PDMS a DVB/PDMS. U těchto kombinovaných adsorpčních vrstev se nejspíš projevila porozita sorbentů (DVB, CAR), které zvětšují specifický povrch, a tím roste kapacita vlákna [69, 72, 74]. Nejnižší množství látek bylo sorbováno homogenními čistými polymery (PA, PDMS), tato vlákna se ukázala být pro naše účely nevhodná. Nepolární vlákno PDMS extrahuje velmi dobře nepolární analyty, ale může být také zdárně aplikováno na polárnější látky, zejména po optimalizování extrakčních podmínek. V případě studovaných látek byly pomocí PDMS vlákna identifikovány všechny alergenní vonné látky, ale v porovnání s ostatními vlákny výtěžky byly nízké. I přes identifikaci všech alergenních látek, vlákno PA poskytovalo nejmenší odezvu, a tudíž nejnižší extrakční výtěžek. Polyakrylátová vrstva je krystalický polymer a analyty difundují skrz něj pomaleji [161]. Z tohoto důvodu potřebovaly analyty patrně delší čas extrakce a inkubace. Vlákna PA a PDMS by byla vhodná k adsorpci spíše těžkavějších látek, tzn. těch, které vycházely z kolony do 38. minuty (**Obrázek 3**).

Z uvedených grafických záznamů (**Obrázek 2 a 3**) lze vyvodit, že CARTM/PDMS vlákno vykazovalo nejvyšší extrakční účinnost pro alergenní vonné látky, a proto bylo vybráno pro zbytek analýz.



Obr. 2 Vliv sorpčních vrstev SPME vláken na extrakci 24-ti studovaných vonných alergenů. Výsledky jsou prezentovány jako průměr sum ploch všech píků na chromatogramu, chybové úsečky udávají směrodatné odchytky měření (n=5).

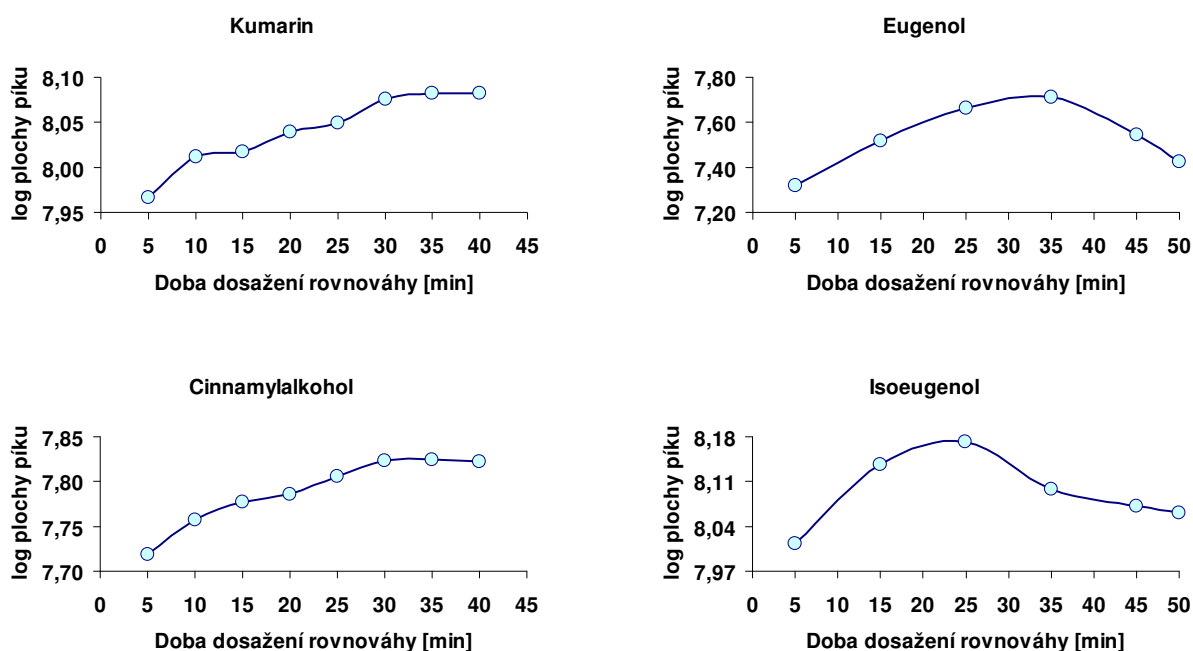


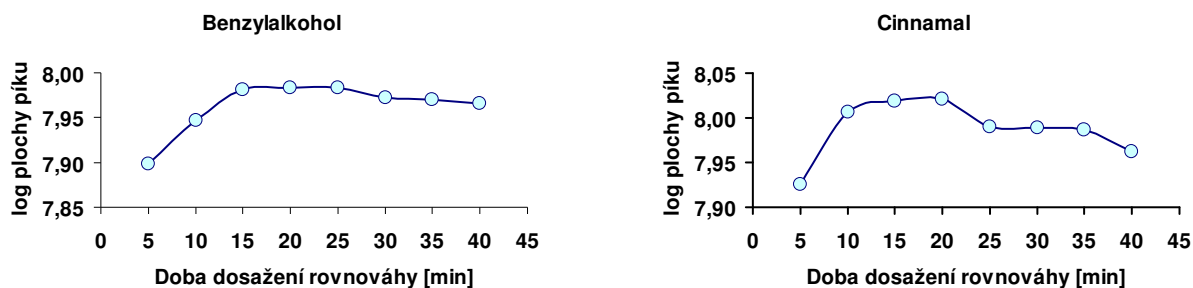
Obr. 3 Vliv sorpčních vrstev SPME vláken na extrakci jednotlivých studovaných vonných alergenů (1-24) ve směsi. Výsledky jsou prezentovány jako průměr ploch píků jednotlivých alergenů (n=5). Značení alergenů viz. Tabulka 13.

5.2.2 Doba dosažení rovnováhy pro jednotlivé standardní látky

HS-SPME je založena na rovnováze analytů mezi třemi fázemi systému. Tyto tři fáze zahrnují sorpční vrstvu, headspace a vzorek. Nejprve je vzorek ponechán v uzavřené vialce pro dosažení rovnováhy mezi headspace a matricí vzorku, poté je do headspace prostoru vloženo SPME vlákno a analyty se sorbují až do dosažení rovnováhy mezi headspace a povrchem vlákna. Jakmile je dosaženo rovnováhy, je koncentrace analytů pokládána za konstantní ve všech třech fázích [126, 161, 162]. Limitujícím krokem v SPME procesu je difúze analytů ze vzorku do headspace prostoru, která může být u větších molekul poměrně pomalá. Z tohoto důvodu musí být nejprve stanovena doba dosažení rovnováhy (tj. matrice vs. headspace) [161].

Doba dosažení rovnováhy („inkubační doba“) pro vonné látky, uvolněné do plynné fáze, byla testována při předběžných podmínkách - teplotě 35 °C, extrakční době 30 minut a době desorpce 10 minut. Byly testovány různé doby inkubace v rozsahu od 5 do 50 minut. Získané výsledky (vyjádřené jako plocha píku) pro 6 vybraných analytů jsou uvedeny v grafech na **Obr. 4**. Je patrné, že potřebná doba je pro jednotlivé analyty různá, neboť závisí na vlastnostech jejich molekul. Těkavější látky se uvolňují mnohem rychleji, než látky méně těkavé [72, 128]. Např. u kumarinu, cinnamylalkoholu nebo eugenolu došlo k dosažení rovnováhy kolem 30. minuty, zatímco nasorbovaná množství benzylalkoholu, isoeugenolu nebo cinnamalu začala touto dobou klesat. Tento pokles může být podle Masucka a kol. [105] způsoben desorpčními procesy, které započaly již během dosahování rovnováhy [105]. Bylo potřeba zvolit vhodný kompromis, kdy bude získaná plocha píku všech sledovaných látek dostatečně velká. Jako optimální byla zvolena pro další experimenty doba 15 minut, v neposlední řadě také kvůli urychlení analýzy.





Obr. 4 Doba dosažení rovnováhy pro vybrané alergenní standardní látky. Výsledky jsou prezentovány jako průměr ploch píků jednotlivých analytů ($n=5$).

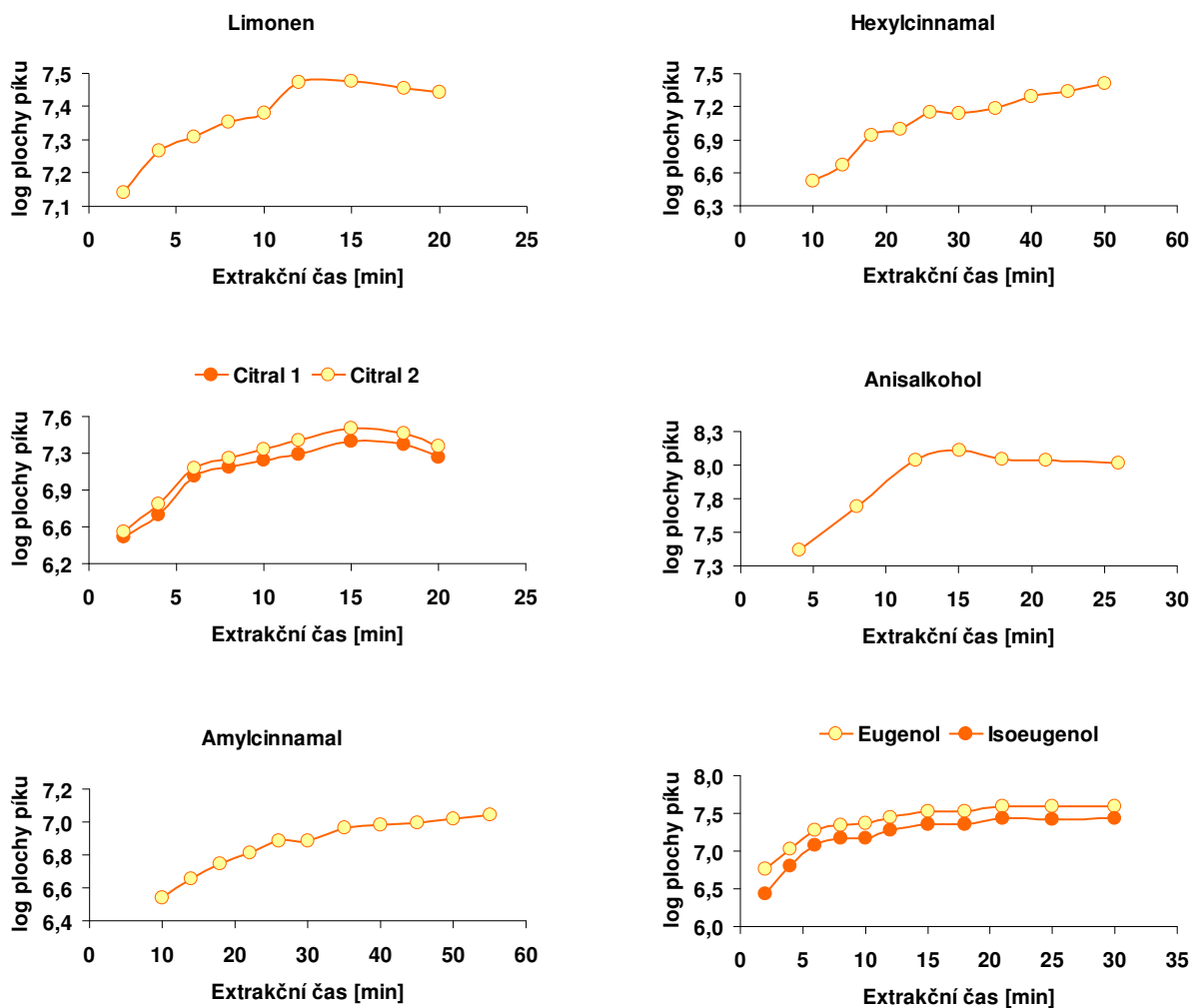
5.2.3 Doba extrakce pro jednotlivé standardní látky

Po optimalizaci doby potřebné pro vytvoření rovnováhy mezi maticí vzorku a headspace prostorem byla testována optimální doba pro extrakci vonných látek z headspace prostoru. Adsorpční, expoziční nebo také extrakční doba je charakterizována jako doba kontaktu vlákna s headspace prostorem nad vzorkem a silně ovlivňuje kvantitativní sorpci na stacionární fázi. Extrakční čas je nejkritičtějším parametrem při vzorkování a závisí na molekulových hmotnostech extrahovaných částic látek a na použitém typu vlákna [69, 72].

Byly testovány extrakční doby v rozsahu od 2 do 50 minut při teplotě 35 °C, inkubační době 15 minut a době desorpce 10 minut. **Obrázek 5** prezentuje závislost plochy píků na době extrakce vybraných studovaných alergenních látek. U většiny z nich bylo dosaženo rovnováhy mezi vláknem a plynnou fází již kolem 15 - 20. minuty (např. anisalkohol, limonen, citral, geraniol, citronellol), ale u standardů jako amylcinnamal a hexylcinnamal nebylo ustáleného stavu dosaženo ani po 50. minutě. Zde se potvrdila závislost extrakčního času na molekulových hmotnostech extrahovaných látek, protože alergenní standardy s nižší molekulovou hmotností dosáhly rovnováhy po 15 min a látky s vyšší molekulovou hmotností až po 40 minutách. To je způsobeno tím, že standardy s vyšší molekulovou hmotností mají nízký difúzní koeficient, což má za následek zpomalení přenosu hmoty a delší dobu dosažení rovnováhy [163].

I když SPME má nejvyšší citlivost a nejlepší reprodukovatelnost až po dosažení rovnováhy, plné dosažení rovnováhy není nutné, protože existuje lineární vztah mezi množstvím adsorbovaného analytu a jeho počáteční koncentrací ve vzorku [69, 74]. Na druhou stranu v průběhu extrakce může dojít k tzv. kompetitivní sorpci, kdy aktivnější analyty obsadí póry vlákna a vytlačí ostatní. Proto není vhodné extrakci příliš protahovat. U kombinovaných sorpčních vrstev krátká doba extrakce zabraňuje přetížení SPME vlákna, a to zejména při extrakci sloučenin s nízkou nebo vysokou afinitou [164].

Opět tedy bylo třeba zvolit vhodný kompromis a jako optimální byla zvolena doba extrakce 20 min. Jak již bylo zmíněno, pro dosažení reprodukovatelných výsledků je nezbytné dodržovat extrakční i inkubační dobu konstantní.



Obr. 5 Doba extrakce pro vybrané alergenní standardní látky. Výsledky jsou prezentovány jako průměr ploch píků jednotlivých analytů ($n=5$).

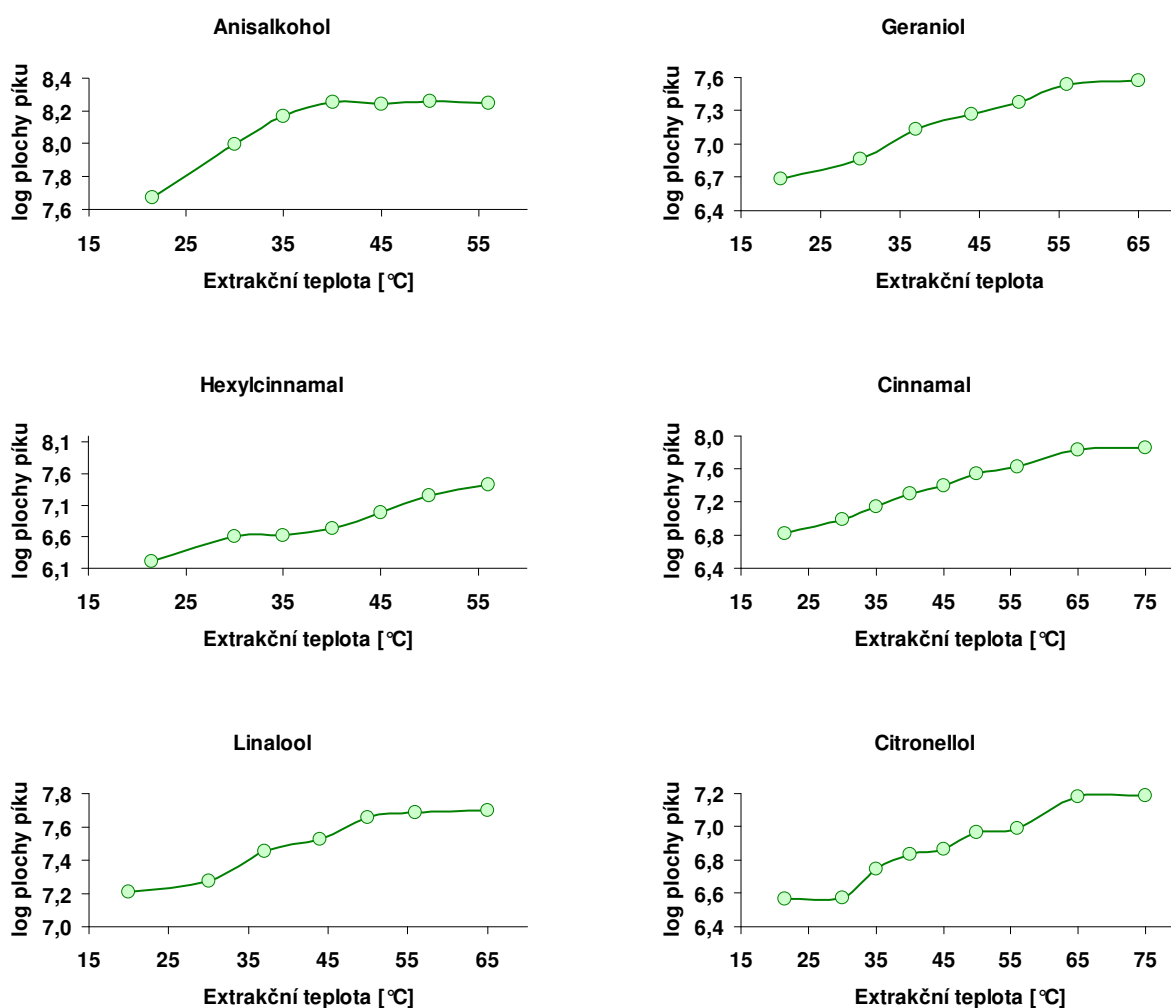
5.2.4 Teplota extrakce pro jednotlivé standardní látky

Za účelem zvýšení koncentrace analytů v headspace prostoru je vzorek obvykle zahříván. Teplota hraje významnou roli v citlivosti SPME metody, protože ovlivňuje distribuční konstantu a difúzní koeficient, který má vliv na migraci vonných látek matricí vzorku a povrchem vlákna. Zvyšování teploty vzorku vede ke snížení distribuční konstanty a růstu difúzního koeficientu, a tím dochází k rychlejšímu dosažení rovnováhy [163].

Vysoká teplota zajišťuje dostatek energie pro těkavé sloučeniny k překonání energetických bariér, které tyto látky vážou v matrici, a také zvyšuje tlak par při procesu přenosu analytů, což usnadňuje uvolňování těkavých látek do headspace prostoru [165].

Vliv teploty byl sledován v rozsahu od laboratorní teploty (20 ± 2 °C), protože těkavější látky mohou být extrahovány již při této teplotě, až do 75 °C, optimalizovaná doba inkubace (20 min) a extrakce (20 min) byly udržovány na konstantní hodnotě. Většina standardů vykazovala postupné zvyšování extrakčních výtěžků (vyjádřené jako plocha píku) až do cca 50 °C (**Obrázek 6**), což dokazuje, že rostoucí teplota podporuje přenos analytů z matrice do headspace prostoru a odsud do vlákna.

I když vyšší teploty umožňují lepší extrakční účinnost méně těkavých látek, nebyly tyto hodnoty použity z důvodu zamezení možné ztráty tepelně nestabilních analytů a degradaci reálného vzorku. Řízené zahřívání vzorku zlepšuje extrakci SPME, nicméně Pellati a kol. [124] a King a kol. [171] ve svých studiích komentovali spojitost s extrakční teplotou tak, že sorpční proces je exotermní povahy a zvýšení teploty může vést ke snížení distribuční konstanty a extrakce látek. Z tohoto důvodu by měla být teplota vzorku optimalizována. Jako optimální byla zvolena teplota 40 °C.



Obr. 6 Vliv teploty na extrakční výtěžek pro vybrané alergenní standardní látky. Výsledky jsou prezentovány jako průměr ploch píků jednotlivých analytů ($n=5$).

5.2.5 Desorpční podmínky pro jednotlivé standardní látky

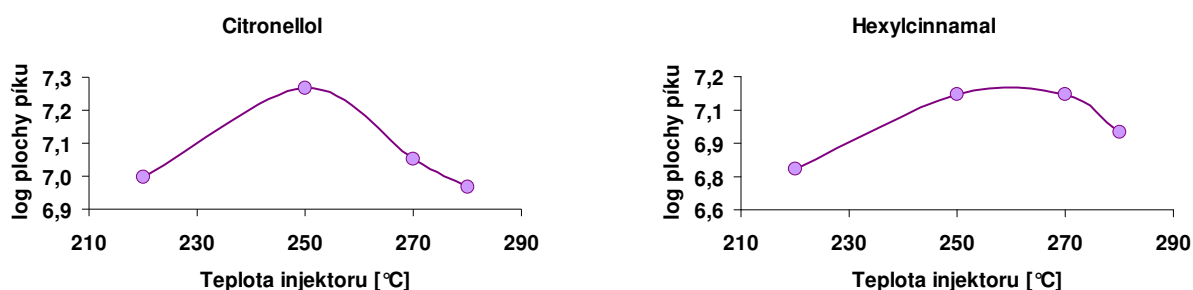
Efektivní tepelná desorpce analytů v injektoru plynového chromatografu závisí na těkavosti analytů, tloušťce vrstvy SPME vlákna, teplotě injektoru a expozičním čase [69].

Teplota injektoru ovlivňuje rychlost desorpce, avšak příliš vysoká teplota nadměrně poškozuje septum v injektoru, také samotné vlákno snese max. teplotu 300 °C a navíc může docházet k tepelnému rozkladu některých látek [74]. Teplota injektoru byla vyšetřována v teplotních bodech 220, 250, 270 a 280 °C. Podle grafického vyjádření (**Obrázek 7**) bylo zjištěno, že odezvy jednotlivých analytů byly maximální mezi 250–270 °C. Při teplotách

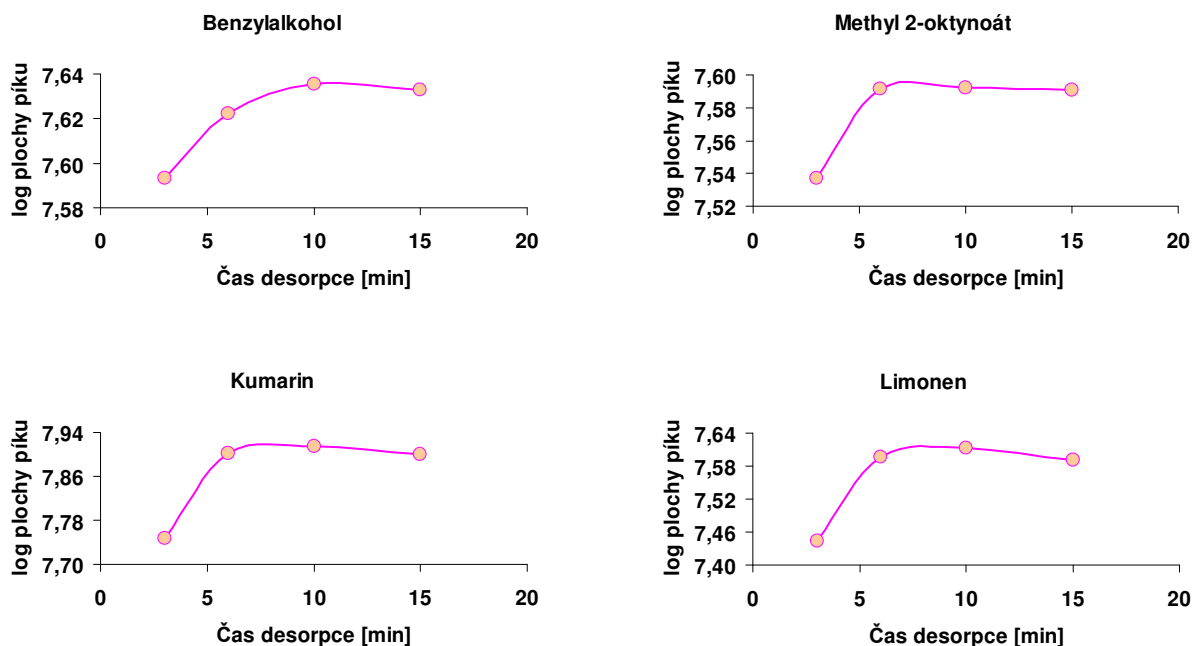
nad 250 °C docházelo u některých látek k poklesu měřeného signálu, což může být pravděpodobně způsobeno nestabilitou studovaných látek. Za účelem zvýšení životnosti SPME vlákna je také vhodné aplikovat nižší teplotu injektoru na úkor delšího desorpčního času. Pro další analýzy byla tedy vybrána teplota injektoru 250 °C.

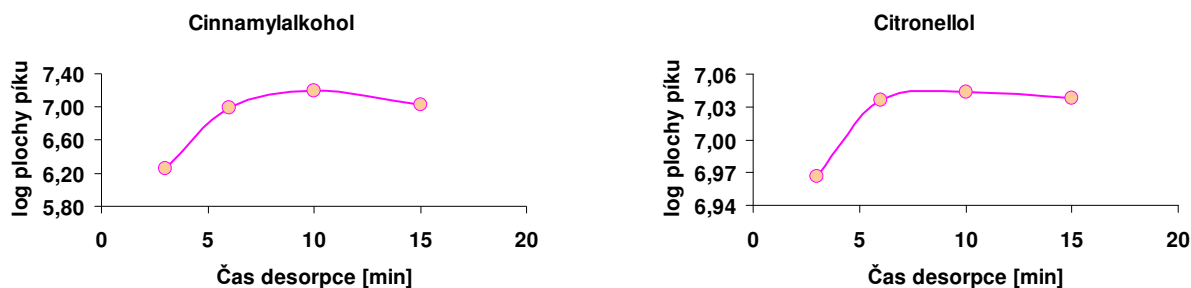
Bylo také nutné stanovit minimální dobu nutnou k odstranění analytů z vlákna. Některé analyty mají totiž tendenci na SPME vlákne setrávat i po desorpčním kroku a způsobují tzv. carry-over efekt [74]. Aby bylo možné tuto dobu určit, bylo SPME vlákno během desorpčního kroku ponecháno v injekčním portu různě dlouhou dobu (3, 6, 10 a 15 min), při teplotě injektoru 250 °C. Z grafické závislosti na **Obrázku 8** vyplývá, že desorpční čas 10 minut byl dostačující k odstranění těkavých látek z vlákna.

Carry-over efekt byl navíc eliminován injekcí prázdného vlákna do plynového chromatografu po každé ukončené analýze a také byla provedena slepá analýza mezi jednotlivými analýzami vzorků a směsí standardních roztoků pro kontrolu zbylých analytů ve vrstvě SPME vlákna.



Obr. 7 Vliv teploty injektoru na extrakční výtěžek pro vybrané alergenní standardní látky. Výsledky jsou prezentovány jako průměr ploch píků jednotlivých analytů (n=5).





Obr. 8 Vliv desorpčního času na extrakční výtěžek pro vybrané alergenní standardní látky. Výsledky jsou prezentovány jako průměr ploch píků jednotlivých analytů ($n=5$).

5.2.6 Multivariační optimalizace SPME metody

Jak je patrné z předchozích kapitol (kap. 5.2.1 - 5.2.5), podmínek, které je potřeba optimalizovat pro dosažení spolehlivých výsledků SPME extrakce, je celá řada. Byly optimalizovány následující parametry: typ vlákna, doba dosažení rovnováhy, doba extrakce, teplota extrakce, doba desorpce. Tyto parametry byly nejprve vyšetřovány pomocí jednorozměrné analýzy dat (viz kap. 5.2.1 - 5.2.5), jejíž princip spočívá v tom, že se mění vždy jeden parametr v čase a ostatní parametry zůstávají během experimentu fixní a sleduje se, jak ovlivní výsledek. Poté se experiment zopakuje s dalším parametrem – tzv. přístup OFAT (*One Factor At Time*) [166]. Nevýhodou tohoto typu experimentu je, že neumožňuje určit, co se stane v případě simultánní variability ostatních parametrů. Celý postup je navíc nesnadný a časově náročný.

Jednou z možností, jak zefektivnit tento proces, je metoda plánování (řízení) experimentů (*Design of Experiment - DOE*). Tato technika umožňuje studovat vliv mnoha nezávislých proměnných (i jejich interakcí) na závislou proměnnou. Umožňuje měnit všechny parametry současně a stanovit optimální pracovní podmínky. Jedná se o matematickou statistickou metodu, pomocí níž se provedením malého počtu pokusů (za předem definovaných podmínek) vyberou ty podmínky, které jsou pro zkoumaný proces významné, ostatní jsou pak zanedbány [167]. Metoda byla původně navržena pro optimalizaci na poli technickém a konstrukčním, stále častěji však nachází uplatnění i v dalších oborech, chemii nevyjímaje, např. [56, 89, 112, 164]. Nespornou výhodou je snížení počtu vlastních experimentů, a tím úspora času i nákladů na jejich realizaci [168].

Statistické zpracování dat se skládá především v nalezení takové kombinace hodnot jednotlivých faktorů, aby byla odezva optimální. Určují se základní faktory, tedy ty, které mají pro daný cíl největší význam a je vypočtena jejich optimální hodnota. Toto zpracování je z větší části založeno na regresní analýze a na analýze rozptylu (*analysis of variance*) [167, 168].

Prvním krokem při plánování experimentu bylo stanovení sledované proměnné (celková plocha píků sledovaných látek). Dále následoval výběr variabilních charakteristik (faktorů) a rozsahu jejich variability - tedy reálné rozmezí, mezi nimiž se nastavení jednotlivých parametrů může měnit a kde mohou nastat potenciální vzájemné interakce zvolených parametrů. Z faktorů ovlivňujících proces SPME extrakce byly pro experimentální design

vybrány 4 parametry (faktory), které mohou mít zásadní vliv na účinnost a přesnost extrakce: inkubační doba (A), doba extrakce (B), teplota extrakce (C) a doba desorpce (D). Rozsah variability těchto parametrů byl zkoumán pomocí výše zmíněné jednorozměrné analýzy (viz *Obr. 4-6, 8*). Zjištěné maximální a minimální hodnoty byly dále použity k multivariační optimalizaci metody. Sledované parametry a jejich uvážené hladiny (maximální a minimální hodnoty) jsou shrnuty v *Tabulce 14*.

Tabulka 14 Faktory využití pro Plackettův-Burmanův plán a rozsah jejich variability

Faktor	Kód faktoru	Nízká hladina (-)	Vysoká hladina (+)
Doba dosažení rovnováhy	A	10 min	25 min
Doba extrakce	B	5 min	25 min
Teplota extrakce	C	25 °C	40 °C
Doba desorpce	D	3 min	10 min

Důležitou součástí metody DOE bylo vypracování experimentálního plánu (podle účelu, kterého chceme dosáhnout). Klasické plánování zahrnuje větší množství metod, kterými lze procesy systematicky vyšetřovat. Při použití plně faktorového plánu jsou u zkoušky měněny všechny parametry, navíc se uvažuje o jednotlivých interakcích. Tento plán má vysokou vypovídací hodnotu, avšak počet experimentů s počtem vyšetřovaných faktorů až neúměrně roste. V takových případech se zanedbává možnost vzájemného ovlivňování proměnných a používá se neúplný faktorový plán. Pokud se podaří identifikovat několik nejzávažnějších interakcí, lze mnohem jednodušším postupem získat podobné výsledky, jako při použití komplikovaného plně faktorového plánu. Jedním z nejvýznamnějších a nejčastěji používaných neúplných faktorových plánů je Plackettův-Burmanův plán. Podstatou Plackett-Burmanova plánu jsou cyklické záměny kombinací úrovní jednotlivých faktorů [169, 170].

Pro vypracování experimentálního plánu byl použit ortogonální návrh podle Placketta-Burmana pro čtyři výše zmíněné faktory A-D s osmi pokusy [169, 170]. V případě faktorů se dvěma úrovněmi prvky nabývají hodnot 1 nebo -1, tj. že každé proměnné se přiřadí dvě hodnoty, vyšší (+) a nižší (-). Do experimentu byly zařazeny i 2 centrální body, což znamená, že kromě krajních bodů byla sledována odezva i v centru experimentální oblasti. Pomocí centrálních bodů lze prověřit lineární chování odezvy. Experimentální plán tedy zahrnoval celkem 10 experimentů v náhodném pořadí, návrh experimentu je shrnut v *Tabulce 15*.

Tabulka 15 Plackett-Burmanův návrh experimentu pro optimalizaci SPME metody

č. analýzy	Doba dosažení rovnováhy [min]	Doba extrakce [min]	Teplota extrakce [°C]	Doba desorpce [min]
1	10	5	40	10
2	17,5	15	32,5	6,5
3	17,5	15	32,5	6,5
4	10	25	25	10
5	25	25	25	3
6	10	5	25	3
7	10	25	40	3
8	25	5	40	3

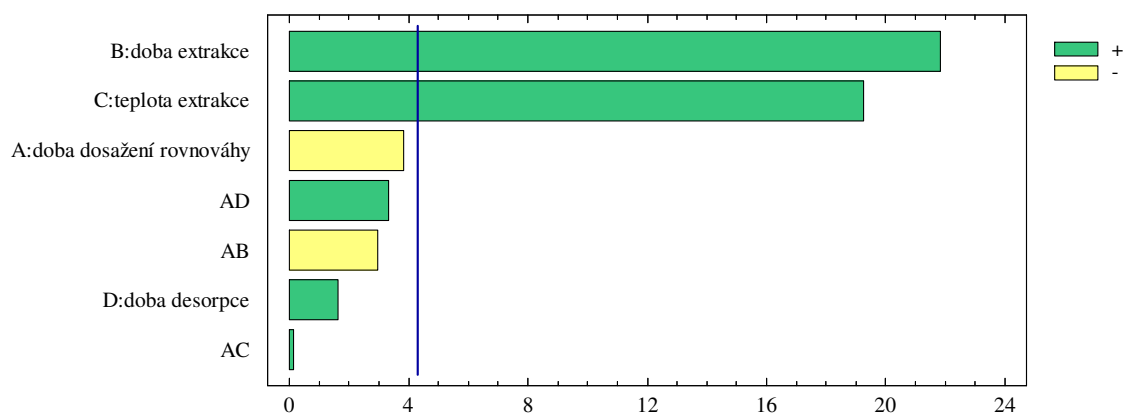
Tabulka 15 Plackett-Burmanův návrh experimentu pro optimalizaci SPME metody - pokračování

9	25	5	25	10
10	25	25	40	10

Poté, co byl vypracován experimentální plán, bylo provedeno deset výše uvedených analýz v pořadí uvedeném v **Tabulce 15**. Pro analýzu byla použita směs 8 alergenních látek (limonen, linalool, methyl 2-oktynoát, citral, citronellool, geraniol, α -isomethyl ionon, benzylalkohol), které byly vybrány na základě různé těkavosti a různé sorpce na SPME vlákno.

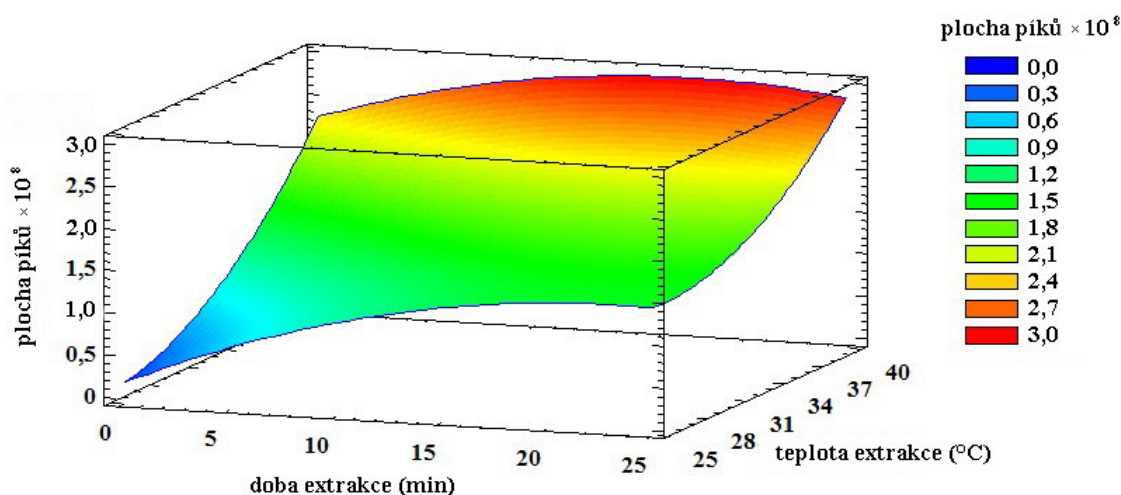
Po provedení navržených experimentů byl statisticky vyhodnocen vliv jednotlivých faktorů na zkoumanou odezvu (celková plocha píků analyzovaných látek). Analýza výsledků spočívá v prozkoumání grafických výstupů tzv. Paretova diagramu efektů, z něhož vyplývá vliv jednotlivých faktorů na vypočtenou odezvu. Kladný efekt značí přímou závislost (čím vyšší nastavení faktoru, tím vyšší odezva), záporný efekt znázorňuje nepřímou závislost, tzn. vyšší nastavení, nižší odezva. Absolutní hodnota efektu (délka pruhu) pak značí důležitost jeho vlivu [167].

Na **Obrázku 9** je znázorněn Paretův diagram efektů zahrnující hlavní faktory a dvoufaktorové interakce pro sledované analyty. Vertikální linie v grafu reprezentuje statisticky významnou hranici na 95% hladině spolehlivosti. Z grafického výstupu Paretova diagramu vyplývá, že extrakční doba (B) a teplota (C) významně ($P < 0,05$) zvyšují účinnost extrakce jednotlivých analytů (přímá závislost), zatímco doba dosažení rovnováhy (A) a doba desorpce (D) nemají na účinnost extrakce významný vliv. Vzájemné interakce faktorů pro získaný model nebyly zjištěny.



Obr. 9 Paretův diagram zobrazující významnost zkoumaných parametrů

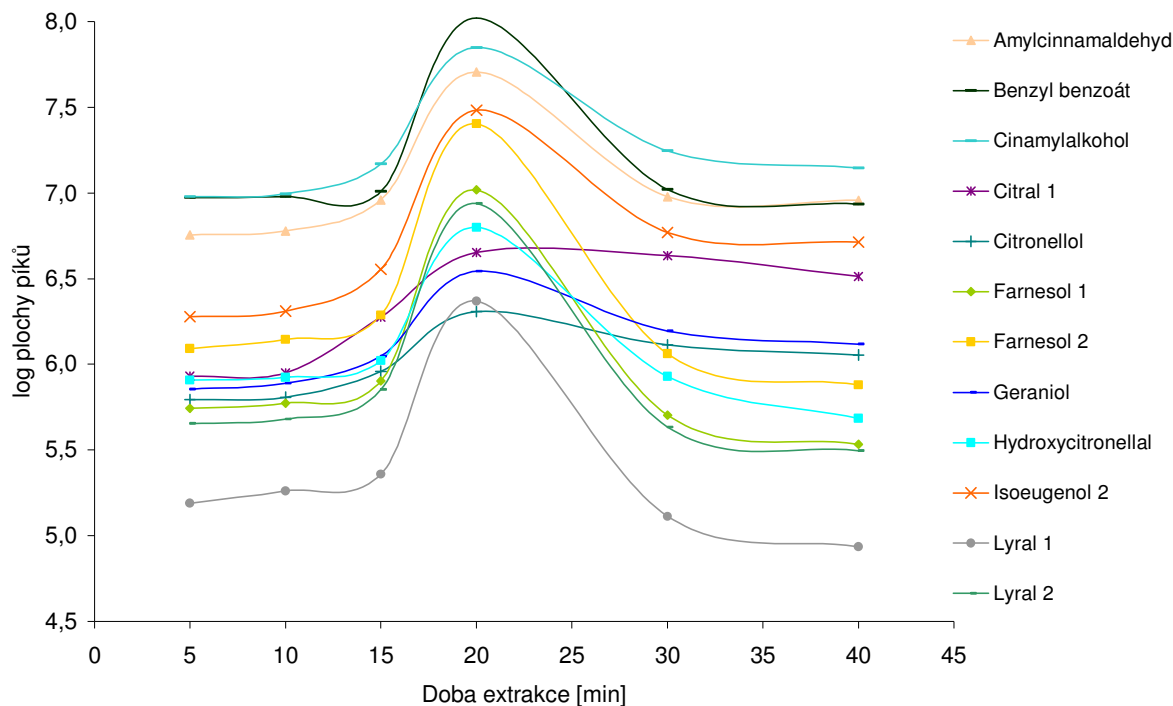
K optimálnímu nastavení souboru experimentálních faktorů byl využit plán responzní plochy (3D graf znázorňující odezvousou plochu). **Obrázek 10** prezentuje 3D graf znázorňující odezvousou plochu pro extrakční čas a teplotu. Analýzou responzní plochy bylo vypočteno optimální nastavení studovaných extrakčních parametrů: extrakční doba 16,8 min a extrakční teplota 39,9 °C.



Obr. 10 Prostorový graf responsní plochy centrálního kompozitního designu. Optimalizované parametry teplota a doba extrakce.

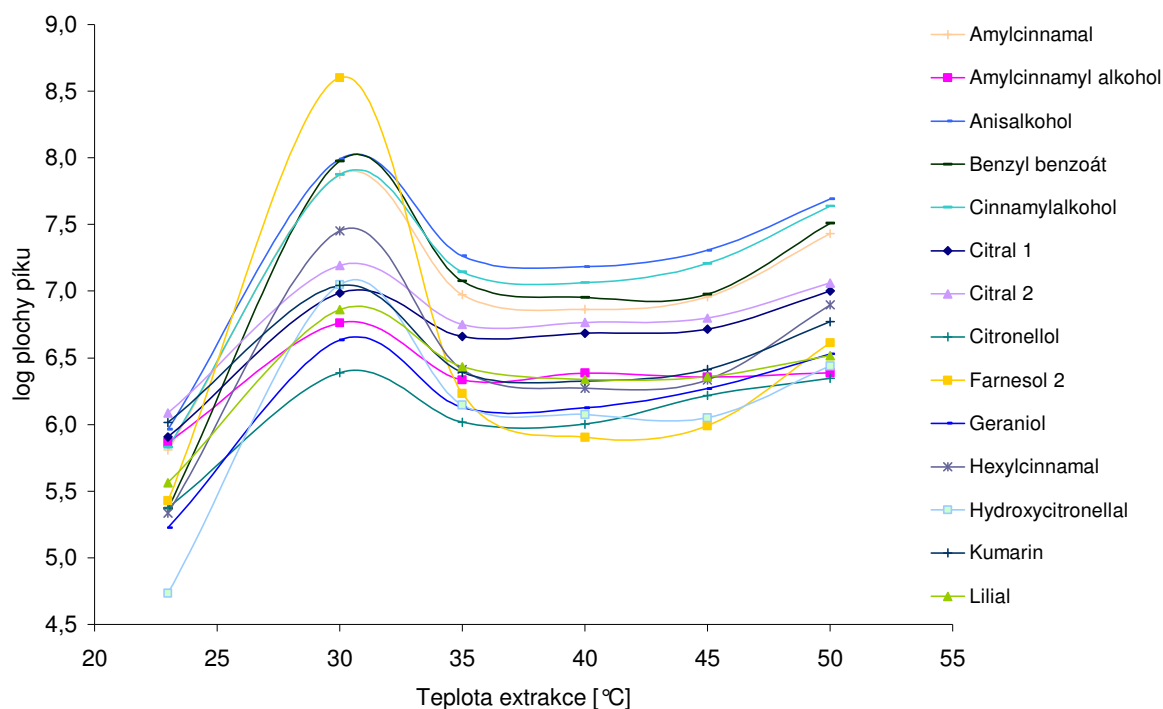
Aby bylo možné definitivně vyhodnotit extrakční účinnost v nových optimalizovaných podmínkách, byly provedeny další experimenty s použitím optimalizované hodnoty teploty, (40 °C) a poté s optimalizovanou hodnotou extrakčního času (17 min.)

Platnost výše navržených optimálních parametrů pomocí multivariační optimalizace byla ověřena experimentálně za použití směsi všech studovaných alergenních látek z důvodu jejich simultánního stanovení v reálných vzorcích. Jelikož bylo prokázáno, že významný ($P < 0,05$) vliv na stanovení alergenních látek mají pouze doba a teplota extrakce, byly testovány pouze tyto dva parametry. V rámci doby extrakce byly testovány následující časy: 5, 10, 15, 20, 30 a 40 minut, přičemž teplota extrakce byla udržována na hodnotě stanovené pomocí multivariační optimalizace (40 °C). Ostatní extrakční parametry byly nastaveny na hodnoty stanovené pomocí jednorozměrné analýzy dat (kap. 5.2.2 a 5.2.5). Výsledky ukázaly (**Obrázek 11**), že při extrakční teplotě 40 °C bylo pro všechny analyty dosaženo největší odezvy ve 20. minutě, pravděpodobně v důsledku saturace všech aktivních míst na SPME vlákně. S postupujícím extrakčním časem (30. a 40. minuta) docházelo k postupné desorpci analytů. Také Hamid a kol. [165] ve své studii konstatovali, že delší extrakční čas v případě obsazení všech aktivních míst na vlákně nemá vliv na účinnost SPME extrakce a někdy může způsobit desorpci.



Obr. 11 Experimentální ověření optimální doby extrakce. Graf znázorňuje vliv doby extrakce na plochu píkú jednotlivých vybraných alergenních vonných látek

Pro ověření optimální teploty extrakce byl testován vliv šesti různých extrakčních teplot (23, 30, 35, 40, 45 a 50 °C) na extrakční výtěžek všech analytů stanovených ve směsi při následujících extrakčních podmínkách: doba dosažení rovnováhy 15 minut (kap. 5.2.2), doba extrakce 17 minut (kap. 5.2.6), doba desorpce 10 minut (kap. 5.2.5). Z grafu na **Obrázku 12** je patrné, že nejvyšší účinnosti bylo dosaženo při teplotě 30 °C.



Obr. 12 Experimentální ověření optimální teploty extrakce. Graf znázorňuje vliv teploty extrakce na plochu píků jednotlivých vybraných alergenních vonných látek

5.2.7 Konečné extrakční podmínky HS-SPME-GC-FID metody

Analýza experimentálního designu ukázala, že významnými a důležitými parametry jsou extrakční teplota a čas. V rámci statistického testování byly jejich hodnoty stanoveny na 40 °C a 17 min. Naproti tomu klasická jednorozměrná analýza směsi všech 24 alergenních látek vyhodnotila jako optimální 30 °C a 20 min. Ačkoliv byla optimální extrakční doba stanovená experimentálně delší než extrakční doba stanovená multivariační analýzou, byla jako konečná zvolena doba 17 minut, především kvůli urychlení analýzy. Jak je patrné z **Obrázku 11**, i při této extrakční době bylo dosaženo dostatečně vysokých celkových ploch píků stanovovaných látek vhodných pro kvantifikaci.

Podle grafické závislosti na **Obrázku 12** bylo dosaženo vyšší odezvy při teplotě 30 °C. Pro další analýzy byla nakonec zvolena teplota 40 °C vycházející z výsledků multivariační analýzy. Tato teplota je bližší teplotě lidského těla, což hraje důležitou roli v aplikaci kosmetických přípravků na pokožku a také při sensorickém hodnocení potravin.

Je třeba brát v úvahu, že volba optimálních podmínek je určitým kompromisem, protože sledované látky se liší svými vlastnostmi a prakticky není možné v rámci jedné analýzy dosáhnout optimálních podmínek pro všechny látky současně.

Po zvážení všech výsledků byly jako konečné extrakční podmínky zvoleny teplota 40 °C a doba extrakce 17 minut. Vyšší teplota umožňuje kratší expoziční čas a tím urychluje dobu analýzy. Výsledné optimální extrakční podmínky, které byly použity pro další analýzy, jsou shrnuty v **Tabulce 16**.

Tabulka 16 Optimální extrakční podmínky HS-SPME-GC-FID metody pro stanovení alergenních látek

Typ SPME vlákna	Doba dosažení rovnováhy [min]	Doba extrakce [min]	Teplota extrakce [°C]	Doba desorpce [min]
CAR™/PDMS	15	17	40	10

5.3 Optimalizace podmínek GC-FID analýzy

Experimentální podmínky GC analýzy byly optimalizovány v rámci diplomové práce autorky [155], pouze teplotní program bylo nutné přizpůsobit dalším vonným alergenům. Teplotní program byl zvolen tak, aby byly jednotlivé látky optimálně separovány v kombinaci s vhodným retenčním časem. Teplotní program: 40 °C 1 min., vzestupný gradient 5 °C . min⁻¹ do 220 °C, 28 min. Nosný plyn N₂ průtok 0,9 ml.min⁻¹. FID detektor 220 °C, průtok H₂ 35 ml.min⁻¹, vzduch 350 ml.min⁻¹, make-up N₂ 30 ml.min⁻¹. Splitless injektor 250 °C uzavřen 5 minut.

5.4 Validace metody HS-SPME-GC-FID

Validace metody HS-SPME-GC-FID byla provedena prostřednictvím vyšetřování linearity, mezí detekce, mezí stanovitelnosti, opakovatelnosti, reprodukovatelnosti a výtěžnosti. Hodnoty validovaných parametrů jsou shrnuty v **Tabulce 17**.

Linearita byla testována na základě sestavení kalibračních přímek závislosti plochy píků na koncentraci dané standardní látky. Každý koncentrační roztok byl podroben třem nezávislým stanovením a získané odezvy (plochy píků) byly zprůměrovány. Kalibrační rozsahy, pro které byly kalibrační přímky vykresleny, obsahují více než pět koncentračních hladin a byly voleny s ohledem na možné koncentrace nalezené v reálných vzorcích (odezvy standardů se řádově shodovaly s odezvami naměřenými u reálných vzorků). Všechny kalibrační křivky byly lineární v testovaných koncentracích a poskytly významné výsledky. Koeficienty determinace (R²) pro kalibrační přímky jsou prezentovány v **Tabulce 17**. Vysoké hodnoty těchto koeficientů prokázaly linearitu v celém uvažovaném rozsahu koncentrací a také ukázaly, že pro stanovení koncentrace alergenů v reálných vzorcích lze použít metodu vnější kalibrace.

Opakovatelnost byla stanovena ze série 5 nezávislých měření během jednoho dne pomocí optimalizované metody HS-SPME-GC-FID. Reprodukovatelnost byla ověřována během pěti různých dní pomocí identické optimalizované metody. Koncentrace alergenních látek testované v rámci těchto validačních parametrů se pohybovaly v centru lineárního rozsahu. Jak opakovatelnost, tak reprodukovatelnost byly vyjádřeny jako relativní směrodatné odchylky a jejich výsledné hodnoty se pohybovaly okolo 5 % (**Tabulka 17**). Získané výsledky byly považovány za uspokojující a dovolují rutinní aplikaci uvedené metody.

Limit detekce a limit kvantifikace pro jednotlivé analyty byly stanoveny podle postupu uvedeného v kap. 4.3.7 a vypočítány podle vzorců 1-4. Pro výpočet bylo nutné sestavit kalibrační přímky závislosti výšky chromatografického píku na koncentraci daného analytu a také zjistit maximální kolísání základní linie, které bylo získáno z chromatogramu příslušející nejnižší detekovatelné koncentraci analytu. Získané limity pro alergenní látky se liší v závislosti na jejich chemické struktuře.

Za účelem ověření použitelnosti HS-SPME-GC-FID metody na reálné vzorky byla testována výtěžnost extrakce. Výtěžnost výše zmíněné metody byla vyhodnocena na základě metody standardního přídávku (vzorec 5, kap. 4.3.8). Volba vzorků záležela na četnosti sledovaných alergenních vonných látek v kosmetickém přípravku, neboť žádný kosmetický přípravek neobsahoval současně všechny studované analyty. Dalším kritériem pro výběr vzorků byla původní cílová koncentrace v kosmetickém přípravku. Pokud byla koncentrace poměrně vysoká, nebylo možné výtěžnost vypočítat. V ostatních případech byla počáteční koncentrace zohledněna pro výpočet výtěžnosti. Vybrané vzorky kosmetických přípravků byly následně spikovány vybranými alergenními standardy v závislosti na výskytu těchto látek v přípravku, a to v rozsahu koncentrací od 20 do 150 $\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$. Naměřené koncentrace byly vypočítány pomocí externí kalibrace. Výsledné hodnoty výtěžnosti vyjádřené v procentech byly nad 80 % a ukázaly významnost a vhodnost HS-SPME-GC-FID metody pro extrakci alergenních vonných látek z reálných vzorků.

Tabulka 17 Validované parametry metody HS-SPME-GC-FID

Alergení vonná látka	Lineární koncentrační rozsah [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]	R²	LOD [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]	LOQ [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]	Opakovatelnost RSD [%]	Reprodukovatelnost RSD [%]
Amylcinnamal	2,4 - 970	0,9997	0,71	2,41	0,5	7,2
Amylcinnamylalkohol	2,5 - 1000	0,9996	0,82	2,54	1,4	6,3
Anisalkohol	0,42 - 1113	0,9991	0,13	0,42	2,8	5,3
Benzylalkohol	0,05 - 1040	0,9994	0,015	0,05	3,5	6,6
Benzylbenzoát	1,09 - 896	0,9996	0,30	1,09	5,3	7,6
Benzylcinnamát	4,95 - 949	0,9963	1,53	4,95	5,8	7,1
Benzylsalicylát	1,16 - 1180	0,9998	0,41	1,16	1,1	4,3
Cinnamal	0,13 - 1153	0,9991	0,04	0,13	1,2	4,1
Cinnamylalkohol	0,46 - 1000	0,9992	0,14	0,46	2,6	6,4
Citral 1	0,89 - 1340	0,9987	0,27	0,89	1,7	6,1
Citral 2	0,89 - 1340	0,9979	0,27	0,89	1,2	6,7
Citronellol	0,89 - 1659	0,9992	0,26	0,89	1,5	6,5
Eugenol	0,64 - 1166	0,9996	0,19	0,64	2,1	6,6
Farnesol 1	0,87 - 1331	0,9994	0,26	0,87	1,8	5,7
Farnesol 2	0,87 - 1331	0,9993	0,26	0,87	1,3	5,1
Farnesol 3	0,87 - 1331	0,9992	0,26	0,87	2,6	4,3
Geraniol	0,22 - 1334	0,9998	0,07	0,22	2,1	6,9
Hexylcinnamal	0,21 - 1048	0,9996	0,06	0,21	1,7	6,1
Hydroxycitronellal	0,22 - 1104	0,9989	0,07	0,22	1,4	5,3
Isoeugenol 1	0,67 - 1080	0,9998	0,22	0,67	0,9	3,9
Isoeugenol 2	0,67 - 1080	0,9998	0,22	0,67	1,3	4,5
α -Isomethyl ionon	0,58 - 1116	0,9993	0,17	0,58	2,6	4,7
Kumarin	0,95 - 1000	0,9993	0,28	0,95	5,8	7,4
Lilial	0,21 - 930	0,9998	0,06	0,21	1,4	4,4

Tabulka 17 Validované parametry metody HS-SPME-GC-FID - pokračování

Limonen	0,42 - 1680	0,9996	0,13	0,42	0,9	5,7
Linalool	0,85 - 1275	0,9997	0,25	0,85	1,8	5,3
Lyrál 1	1 - 1000	0,9998	0,28	0,97	3,4	5,2
Lyrál 2	1 - 1000	0,9999	0,23	0,96	3,1	5,2
Methyl 2-oktynoát	0,023 - 1201	0,9998	0,007	0,023	4,4	4,6

R^2 - koeficient determinace; LOD - limit detekce; LOQ - limit kvantifikace; RSD - relativní směrodatná odchylka

5.5 Monitoring vonných alergenů v reálných vzorcích

Optimalizovaná a validovaná metoda HS-SPME-GC-FID byla aplikována na analýzu reálných vzorků zahrnující 34 kosmetických přípravků typu *leave-on* a *rinse-off*, 42 vzorků potravin (čaje, výluhy čajů, alkoholické a nealkoholické nápoje, bonbóny), 3 vzorky avivážních prostředků a 3 vzorky dětských hraček.

Sledované analyty byly ve vzorcích identifikovány na základě retenčních časů standardů (viz **Tabulka 13**) a kvantifikovány metodou přímého srovnání s vnějším standardem. Každý vzorek byl analyzován třikrát ($n=3$). Chromatogramy vybraných reálných vzorků jsou uvedeny v Příloze C.

Vzorky kosmetických přípravků obsahovaly širokou škálu výrobků určenou k ústní hygieně, k ošetření dětské pokožky, k péči o pleť nebo tělo. Na obalech těchto produktů byl uveden jak termín „*Parfum/Fragrance*“, tak také zde byly jmenovitě uvedeny jednotlivé obsažené alergenní látky přesahující legislativní limit.

U vzorků potravin byly vybrány takové výrobky, u kterých lze předpokládat, že byly aromatizovány. Na jejich obale byl uveden pouze termín „aroma“.

Všechny výsledky jsou uvedeny ve tvaru průměr \pm směrodatná odchylka ($n=3$) v **Tabulkách 18-99**.

5.5.1 Kosmetické přípravky

5.5.1.1 Kosmetické přípravky určené k ústní hygieně

Vzorky Z1 - Z5 reprezentovaly zubní pasty určené pro děti. Jedná se o kosmetické přípravky typu *rinse-off*, tedy přípravky smývatelné do 20-ti minut. Alergenní vonné látky v nich obsažené musí být uvedeny v seznamu ingrediencí, pokud jejich koncentrace překročí $100 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$. Tuto podmínku splnil vzorek Z2 vyrobený v České republice a vzorek Z3 z Velké Británie. Ostatní vzorky (Z1, Z4, Z5) obsahovaly mezi identifikovanými vonnými alergeny zástupce, kteří deklarovanou hranici $100 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ překročily ($P<0,05$) a nebyly uvedeny mezi ingrediencemi na obale produktu (**Tabulka 18-22**). Dětské zubní pasty mají většinou výraznou jahodovou nebo ovocnou chuť a vůni syntetického původu, což také vypovídá o počtu identifikovaných alergenních látek. U přípravků pro děti je riskantní a nebezpečné používat mnoho alergenních látek, protože ve většině případů jsou tyto zubní pasty dětmi polykány, ale z hlediska chutnosti, vůně a celkové atraktivnosti výrobku je to zřejmě nevyhnutelné. Přípravek Z6 (**Tabulka 23**) reprezentoval ústní vodu vyrobenou ve Velké Británii a podle kvantifikace identifikovaných vonných alergenů splňuje kosmetickou direktivu.

Tabulka 18 Vonné alergeny identifikované ve vzorku zubní pasty Z1

Zubní pasta Z1		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Cinnamal	Cinnamal	540 \pm 19
Eugenol	Eugenol	651 \pm 12
Limonen	Limonen	3105 \pm 169 *

Tabulka 18 Vonné alergenů identifikované ve vzorku zubní pasty Z1 - pokračování

Aroma	Amylcinnamylalkohol	57 ± 10
	Linalool	208 ± 13
	Isoeugenol 1	90 ± 8
	Isoeugenol 2	63,2 ± 1,6
	α-Isomethyl ionon	15,2 ± 1,3
	Citral 1	97 ± 10
	Citral 2	160 ± 4
	Anisalkohol	0,423 ± 0,005
	Cinnamylalkohol	2,940 ± 0,018
	Benzybenzoát	18,6 ± 0,5

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 19 Vonné alergenů identifikované ve vzorku zubní pasty Z2

Zubní pasta Z2		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [μg·g⁻¹]
Aroma	Linalool	7,66 ± 0,13
	Citral 2	10,3 ± 0,3
	Cinnamylalkohol	22,8 ± 0,9
	α-Isomethyl ionon	4,51 ± 0,08
	Benzyalkohol	2,7 ± 0,5
	Lilial	2,402 ± 0,013
	Cinnamal	1,530 ± 0,008

Tabulka 20 Vonné alergenů identifikované ve vzorku zubní pasty Z3

Zubní pasta Z3		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [μg·g⁻¹]
Aroma	Cinnamal	50 ± 3
	Citral 1	33,3 ± 1,4
	α-Isomethyl ionon	4,39 ± 0,05
	Eugenol	10,2 ± 0,4
	Isoeugenol 1	27,2 ± 1,8
	Isoeugenol 2	22,2 ± 1,3
	Amylcinnamal	82 ± 5
	Linalool	50,2 ± 1,3
	Amylcinnamylalkohol	7,59 ± 0,12

Tabulka 21 Vonné alergenů identifikované ve vzorku zubní pasty Z4

Zubní pasta Z4		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Benzyl lcohol	Benzylalkohol	387 ± 21
Limonen	Limonen	5581 ± 333 *
Aroma	Linalool	76 ± 7
	Citral 1	18,9 ± 0,9
	Citral 2	470 ± 17
	α -Isomethyl ionon	9,13 ± 0,29
	Anisalkohol	4,22 ± 0,24
	Cinnamal	69 ± 6
	Isoeugenol 1	20,13 ± 0,12
	Isoeugenol 2	26,8 ± 2,1
	Amylcinnamal	195 ± 14
	Farnesol 1	5,36 ± 0,17
	Farnesol 2	10,5 ± 0,8
	Farnesol 3	32 ± 2
	Hexylcinnamal	15,82 ± 0,25
	Kumarin	15,9 ± 1,3
	Benzylbenzoát	186 ± 12
	Benzylsalicylát	115 ± 3

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 22 Vonné alergenů identifikované ve vzorku zubní pasty Z5

Zubní pasta Z5		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Benzylalkohol	Benzylalkohol	294 ± 4
Limonen	Limonen	2466 ± 185 *
Aroma	Cinnamylalkohol	32,2 ± 2,3
	Citral 1	55,7 ± 2,7
	Citral 2	988 ± 65
	Linalool	604 ± 93
	Benzylbenzoát	25,18 ± 1,17
	Amylcinnamal	33 ± 5
	Cinnamal	6,29 ± 0,22
	α -Isomethyl ionon	5,50 ± 0,06

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 23 Vonné alergeny identifikované ve vzorku ústní vody Z6

Ústní voda Z6		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Aroma	Linalool	41,2 ± 0,9
	Citral 1	61 ± 4
	α -Isomethyl ionon	6,34 ± 0,12
	Amylcinnamal	19,3 ± 0,7
	Cinnamylalkohol	6,7 ± 0,5
	Hexylcinnamal	6,72 ± 0,09
	Benzylbenzoát	41,7 ± 2,9

5.5.1.2 Kosmetické přípravky určené k péči o pleť (pleťové vody)

Vzorky kosmetických přípravků *leave-on* (max. limit 10 mg.kg⁻¹) K1-K4 zastupovaly pleťové vody jak tuzemského výrobce, tak producentů zahraničních. Ve vzorcích K1-K3 byl vždy identifikován alespoň jeden vonný alergen přesahující ($P < 0,05$) koncentraci 10 mg.kg⁻¹ a nebyl uveden v seznamu ingrediencí. V souladu s kosmetickou direktivou byl pouze vzorek K4. Tyto vzorky nebyly vybírány z řady přírodní kosmetiky. Tento fakt byl potvrzen také tím, že ve všech případech obsahovaly v přírodě se nevyskytující vonné alergeny, a to α -isomethyl ionon, lilial a navíc také hydroxycitronellal u vzorku K3 (**Tabulka 24-27**).

Tabulka 24 Vonné alergeny identifikované ve vzorku pleťové vody K1

Olivová pleťová voda K1		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Benzylalkohol	Benzylalkohol	175,8 ± 1,3
Butylphenyl Methylpropional	Butylphenyl Methylpropional	152 ± 14
Linalool	Linalool	170,8 ± 1,2
Citronellol	Citronellol	44,4 ± 1,5
Limonen	Limonen	84 ± 6
Benzylsalicylát	Benzylsalicylát	31,8 ± 1,5
Eugenol	Eugenol	277 ± 33
Parfum	Amylcinnamal	29,8 ± 2,5
	Cinnamylalkohol	9,102 ± 0,014
	Benzylbenzoát	16 ± 3
	Geraniol	6,4 ± 0,5
	α -Isomethyl ionon	67,4 ± 1,7
	Hexylcinnamal	5,58 ± 0,09
	Kumarin	9,6 ± 0,6

Tabulka 25 Vonné alergeny identifikované ve vzorku pleťové vody K2

Jemná pleťová voda K2		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Lyrál	Lyrál 1	33,66 ± 1,08
	Lyrál 2	24,5 ± 0,6
Lilial	Lilial	29,4 ± 1,3
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	57 ± 8
Parfum/Fragrance	Citronellol	6,8 ± 1,4
	Geraniol	4,1 ± 0,4
	Linalool	15,3 ± 1,3
	Benzylalkohol	0,3130 ± 0,0013

Tabulka 26 Vonné alergeny identifikované ve vzorku pleťové vody K3

Pleťová voda vyživující K3		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Cinnamylalkohol	Cinnamylalkohol	13,3 ± 0,6
Hydroxycitronellal	Hydroxycitronellal	16,4 ± 0,9
Kumarin	Kumarin	20,1 ± 0,8
Geraniol	Geraniol	154 ± 15
Lyrál	Lyrál	neidentifikováno
Benzylbenzoát	Benzylbenzoát	31 ± 2
Citronellol	Citronellol	222 ± 24
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	1572 ± 119 *
Parfum	Linalool	1394 ± 73 *
	Benzylalkohol	5,34 ± 0,09
	Lilial	6,70 ± 0,17

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 27 Vonné alergeny identifikované ve vzorku pleťové vody K4

Vyhlazující pleťová voda K4		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Limonen	Limonen	245 ± 14
Linalool	Linalool	2675 ± 29 *
Benzylsalicylát	Benzylsalicylát	47,6 ± 1,9
Benzylalkohol	Benzylalkohol	74,4 ± 4,3
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	534 ± 20
Geraniol	Geraniol	311 ± 11
Citronellol	Citronellol	891 ± 10
Kumarin	Kumarin	10,7 ± 0,3
Parfum/Fragrance	Amylcinnamylalkohol	8,06 ± 0,05
	Benzylbenzoát	7,41 ± 0,17

Tabulka 27 Vonné alergeny identifikované ve vzorku pleťové vody K4 - pokračování

	Lilial	3,540 ± 0,009
	Cinnamylalkohol	118 ± 11

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.1.3 Kosmetické přípravky určené k péči o pleť (pleťové krémy, pleťová maska, balzám)

Pleťové krémy spadají do skupiny kosmetických přípravků typu *leave-on* (max limit 10 mg.kg⁻¹). Vzorek kosmetického přípravku K5 obsahoval relativně mnoho alergenních vonných látek (17), přičemž benzylbenzoát překračující (P<0,05) legislativně stanovenou hranici 10 mg.kg⁻¹ nebyl uveden na obale (**Tabulka 28**). Tato látka je široce využívaná jako stabilizátor vůní nebo jako rozpouštědlo [171], ale i přesto by měla být uvedena na obale. Téměř všechny vonné alergeny, které byly identifikovány ve vzorku K6, nebyly uvedeny na jeho obale a nesplňovaly tak kosmetickou direktivu. Koncentrace těchto látek se pohybovaly nad 10 mg.kg⁻¹ (P<0,05), což vyžaduje jejich označení na obale výrobku. (**Tabulka 29**). Naopak u vzorku K7 vyrobeného v České republice byly všechny identifikované alergenní látky v souladu s kosmetickou direktivou (**Tabulka 30**). Vzorek K8 představoval dětský pleťový krém, který měl na svém obalu napsáno „jemná parfemace vyhovuje nejnovějším požadavkům alergologů“. Získané výsledky ukázaly, že přípravek splňoval kosmetickou direktivu, kromě linaloolu, který mírně (P<0,05) překračoval povolenou koncentraci (**Tabulka 31**). Vzorek K9 představoval balzám na rty ovocné vůně a fialové barvy. Výrobek měl na etiketě označenou zemi původu PRC (*People's Republic of China*), přičemž obal výrobku napovídal výrobu v Londýně. Tento *leave-on* přípravek nesplnil legislativní omezení, čtyři alergenní látky překročily (P<0,05) stanovenou hranici 10 mg.kg⁻¹ (**Tabulka 32**). Vzorek pleťové masky K10 zastupoval kosmetický přípravek typu *rinse-off*. Identifikované látky, jejichž koncentrace se pohybovaly nad legislativně stanovenou koncentrací 100 mg.kg⁻¹, byly uvedeny na obale výrobku, a tudíž byly v souladu s kosmetickou direktivou (**Tabulka 33**).

Tabulka 28 Vonné alergeny identifikované ve vzorku pleťového krému K5

Přírodní olivový krém K5		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [µg.g ⁻¹]
Linalool	Linalool	256,73 ± 1,18
Citronellol	Citronellol	213 ± 10
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	13,60 ± 0,16
Geraniol	Geraniol	177 ± 9
Benzylsalicylát	Benzylsalicylát	20,0 ± 0,6
Benzylalkohol	Benzylalkohol	18,9 ± 0,9
Limonen	Limonen	57 ± 12
Hydroxycitronellal	Hydroxycitronellal	24,0 ± 0,8
Citral	Citral 1	47,2 ± 2,4
	Citral 2	2851 ± 214 *
Amylcinnamal	Amylcinnamal	102,7 ± 2,3
Cinnamylalkohol	Cinnamylalkohol	49 ± 5
Parfum (Fragrance)	α-Isomethyl ionon	5,85 ± 0,15

Tabulka 28 Vonné alergený identifikované ve vzorku pleťového krému K5 - pokračování

	Cinnamal	20,2 ± 0,6
	Benzylbenzoát	44 ± 2
	Eugenol	3,08 ± 0,06
	Kumarin	2,74 ± 0,05
	Farnesol 1	3,86 ± 0,14
	Farnesol 2	4,34 ± 0,07
	Farnesol 3	4,8 ± 0,3

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 29 Vonné alergený identifikované ve vzorku pleťového krému K6

Kozí mléko, denní krém K6		
Vonné alergený uvedené na obalu	Identifikované vonné alergený	c [µg·g⁻¹]
Linalool	Linalool	245 ± 6
Lilial	Lilial	17,9 ± 0,9
Citronellol	Citronellol	76 ± 4
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	50,4 ± 2,5
Geraniol	Geraniol	31,80 ± 0,14
Eugenol	Eugenol	38 ± 4
Benzylsalicylát	Benzylsalicylát	299 ± 15
α-Isomethyl ionon	α-Isomethyl ionon	34 ± 6
Kumarin	Kumarin	49 ± 11
Limonen	Limonen	62 ± 4
Fragrance	Hydroxycitronellal	9,99 ± 0,07
	Benzylalkohol	0,880 ± 0,003
	Cinnamal	16,17 ± 0,18
	Amylcinnamal	32,9 ± 2,6
	Anis alkohol	11,1 ± 0,3
	Cinnamylalkohol	14,5 ± 0,5
	Methyl 2-oktynoát	4,61 ± 0,07
	Farnesol 1	12,8 ± 0,9
	Farnesol 2	29,1 ± 1,8
	Farnesol 3	34,2 ± 1,8
Isoeugenol 1	Isoeugenol 1	19,3 ± 0,9
	Isoeugenol 2	37,6 ± 1,3
Lyrál 1	Lyrál 1	1,72 ± 0,07
	Lyrál 2	< LOD

Tabulka 30 Vonné alergený identifikované ve vzorku pleťového krému K7

Výživný krém K7		
Vonné alergený uvedené na obalu	Identifikované vonné alergený	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Amylcinnamal	Amylcinnamal	20,6 ± 1,2
Eugenol	Eugenol	50 ± 5
Hydroxycitronellal	Hydroxycitronellal	17,6 ± 0,5
Kumarin	Kumarin	10,42 ± 0,23
Citronellol	Citronellol	292 ± 22
Butylphenyl Methylpropional	Butylphenyl Methylpropional	28,6 ± 1,9
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	122,4 ± 2,4
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	87,3 ± 2,3
Parfum	Linalool	1358 ± 54 *
	Cinnamal	5,93 ± 0,09
	Benzylalkohol	4,099 ± 0,007

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 31 Vonné alergený identifikované ve vzorku dětského krému K8

Dětský ochranný krém K8		
Vonné alergený uvedené na obalu	Identifikované vonné alergený	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Parfum	Linalool	10,22 ± 0,15
	Citronellol	4,49 ± 0,08
	Benzylalkohol	0,171 ± 0,008
	Lilial	2,260 ± 0,013
	Cinnamal	2,241 ± 0,014

Tabulka 32 Vonné alergený identifikované ve vzorku balzámu K9

Balzám na rty K9		
Vonné alergený uvedené na obalu	Identifikované vonné alergený	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Limonen	Limonen	385 ± 33
Aroma	Amylcinnamylalkohol	7,95 ± 0,22
	α -Isomethyl ionon	29,4 ± 0,7
	Linalool	45 ± 5
	Methyl 2-oktynoát	16,64 ± 0,03
	Cinammylalkohol	14,6 ± 0,3
	Benzylalkohol	0,940 ± 0,014

Tabulka 33 Vonné alergeny identifikované ve vzorku pleťové masky K10

Pleťová maska čistící K10		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Limonen	Limonen	143 ± 3
Citral	Citral 1	3058 ± 12 *
	Citral 2	2746 ± 23 *
Geraniol	Geraniol	609 ± 4
Parfum	Benzylbenzoát	33,9 ± 1,3
	Linalool	6,42 ± 0,23
	Citronellol	3,06 ± 0,04
	Hydroxycitronellal	4,03 ± 0,09
	Hexylcinnamal	4,51 ± 0,07
	α -Isomethyl ionon	13,3 ± 0,3
	Amylcinnamylalkohol	6,89 ± 0,09
	Amylcinnamal	95 ± 3
	Benzylalkohol	0,232 ± 0,002
	Lilial	4,60 ± 0,08
	Cinnamal	2,043 ± 0,002

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.1.4 Kosmetické přípravky určené k péči o pleť (vody po holení)

Vzorky kosmetických přípravků K11 a K12 reprezentovaly vody po holení určené pro muže, vyrobené v České republice. Oba vzorky se vyznačovaly velmi výraznou vůní, jak je patrné i z výsledků sensorického hodnocení (*Obrázek 17*), čemuž také odpovídá počet identifikovaných vonných alergenů. V případě vzorku K11 byly identifikovány téměř všechny sledované vonné alergeny, z nichž některé přesáhly ($P < 0,05$) koncentraci $10 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ a nebyly uvedeny na obale výrobku (*Tabulka 34*). Vzorek K12 pocházel od stejného výrobce, což také dokazuje fakt, že zastoupení vonných alergenů bylo velmi podobné. Také v tomto případě nebyly některé látky v souladu s kosmetickou direktivou, poněvadž nebyly uvedeny na obale (*Tabulka 35*). Hojnější zastoupení alergenních vonných látek s relativně vyšší koncentrací není u těchto produktů příliš vhodné z toho důvodu, že přípravek je nanášen na čerstvě oholenou pokožku. Tím, že je pokožka určitým způsobem narušena, mohou alergeny lépe penetrovat do pokožky a způsobit podráždění, popř. alergickou reakci.

Tabulka 34 Vonné alergeny identifikované ve vzorku vody po holení K11

Kolínská voda K11		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Amylcinnamal	Amylcinnamal	495 ± 57
Hydroxycitronellal	Hydroxycitronellal	105 ± 11
Linalool	Linalool	357 ± 80
Citronellol	Citronellol	279 ± 27
Benzylalkohol	Benzylalkohol	19,2 ± 0,9

Tabulka 34 Vonné alergenů identifikované ve vzorku vody po holení K11 - pokračování

Benzylobenzoát	Benzylobenzoát	70 ± 5
Benzylocinamat	Benzylocinamat	96 ± 6
Cinnamal	Cinnamal	36 ± 3
Citral	Citral 1	24 ± 3
	Citral 2	390 ± 32
Eugenol	Eugenol	37 ± 3
Geraniol	Geraniol	34,1 ± 2,4
Limonen	Limonen	2009 ± 187 *
α-Isomethyl ionon	α-Isomethyl ionon	215 ± 22
Kumarin	Kumarin	20,9 ± 1,5
Parfum	Cinnamylalkohol	8,5 ± 0,5
	Isoeugenol 1	13,4 ± 1,3
	isoeugenol 2	7,32 ± 1,13
	Lilial	28 ± 3
	Farnesol 1	18,46 ± 1,23
	Farnesol 2	19,6 ± 1,5
	Farnesol 3	20,7 ± 1,8
	Hexylcinnamal	10,5 ± 0,9
	Lyrál 1	1,47 ± 0,04
	Lyrál 2	5,0 ± 0,4

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 35 Vonné alergenů identifikované ve vzorku vody po holení K12

Voda po holení K12		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [μg.ml⁻¹]
Amylcinnamal	Amylcinnamal	90 ± 5
Benzyloalkohol	Benzyloalkohol	42 ± 5
Benzylobenzoát	Benzylobenzoát	38 ± 4
Benzylocinamat	Benzylocinamat	88 ± 10
Citral	Citral 1	113 ± 7
	Citral 2	32,7 ± 1,4
Citronellol	Citronellol	70,9 ± 1,3
Kumarin	Kumarin	16,86 ± 1,16
Geraniol	Geraniol	51 ± 8
Limonen	Limonen	6157 ± 382 *
Linalool	Linalool	130 ± 18
α-Isomethyl ionon	α-Isomethyl ionon	86 ± 6
Parfum	Amylcinnamylalkohol	8,09 ± 0,27
	Isoeugenol 1	46 ± 3
	Isoeugenol 2	21,0 ± 1,6
	Hydroxycitronellal	9,1 ± 0,9
	Cinnamylalkohol	44 ± 6

Tabulka 35 Vonné alergeny identifikované ve vzorku vody po holení K12 - pokračování

	Farnesol 1	13,4 ± 0,9
	Farnesol 2	14,64 ± 1,06
	Farnesol 3	20,5 ± 1,8
	Hexylcinnamal	6,9 ± 0,4

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.1.5 Kosmetické přípravky určené k péči o tělo (tělové máslo, tělové mléko)

Vzorky kosmetických přípravků K13 (tělové máslo) a K14 (tělové mléko) jsou zástupci přípravků typu *leave-on*. Vzorek K13 měl na své etiketě opět označenou zemi původu PRC, přičemž obal přípravku naznačoval výrobu v Londýně. Identifikované alergenní vonné látky, které se skrývaly pod názvem „*parfum*“, nepřesáhly koncentraci 10 mg.kg⁻¹ a nebylo nutné je prezentovat jednotlivě na etiketě přípravku. Výrobek splnil nařízení kosmetické legislativy (**Tabulka 36**). U vzorku K14 pouze benzylbenzoát překročil (P<0,05) legislativně stanovenou koncentraci 10 mg.kg⁻¹ (**Tabulka 37**). Benzylbenzoát je široce používán v kosmetice různého druhu nejen jako vonná látka, ale také jako stabilizátor dalších vonných látek nebo jako rozpouštědlo [171].

Tabulka 36 Vonné alergeny identifikované ve vzorku tělového másla K13

Tělové máslo K13		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [µg.g⁻¹]
Kumarin	Kumarin	19,6 ± 0,7
α-Isomethyl ionon	α-Isomethyl ionon	82 ± 9
Parfum	Amylcinnamal	4,2 ± 0,4
	Citral 1	6,65 ± 0,13
	Citral 2	3,33 ± 0,03
	Citronellol	1,250 ± 0,014
	Geraniol	2,75 ± 0,03
	Benzylalkohol	0,431 ± 0,003
	Eugenol	2,35 ± 0,13
	Benzylbenzoát	3,4 ± 0,4

Tabulka 37 Vonné alergeny identifikované ve vzorku tělového mléka K14

Tělové mléko K14		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [µg.g⁻¹]
Citral	Citral 1	3413 ± 195 *
	Citral 2	3677 ± 3 *
Limonen	Limonen	2418 ± 116 *
Lilial	Lilial	91 ± 14
Linalool	Linalool	995,6 ± 1,6
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	34 ± 6
Citronellol	Citronellol	144 ± 3

Tabulka 37 Vonné alergeny identifikované ve vzorku tělového mléka K14 - pokračování

Parfum	Benzylbenzoát	53,1 ± 1,3
	Anisalkohol	8,3 ± 0,5
	Amylcinnamylalkohol	6,18 ± 0,14
	Amylcinnamal	5,57 ± 0,09

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.1.6 Kosmetické přípravky určené k péči o tělo (sprchové gely, šampón)

Kosmetické výrobky typu *rinse-off* (max. limit 100 mg.kg⁻¹) reprezentují vzorky K15-18, sprchové gely. U vzorku K15 byl na samotné koncentrační hranici (P<0,05) cinnamylalkohol, nicméně kosmetický přípravek splnil nařízení kosmetické direktivy (**Tabulka 38**). Naopak u vzorku K16 byl cinnamylalkohol kvantifikován nad 100 mg.kg⁻¹ (P<0,05) a nebyl uveden na etiketě výrobku. Ostatní vonné alergeny byly prezentovány řádně dle směrnice (**Tabulka 39**). Vzorek sprchového gelu K17 reprezentoval pánský sprchový gel kořeněné vůně a splnil nařízení kosmetické direktivy o značení vonných alergenů na obale výrobku (**Tabulka 40**). Posledním zástupcem sprchových gelů byl vzorek K18 s vůní citrónové trávy. Opět legislativně stanovenou koncentrační hladinu překročil (P<0,05) cinnamylalkohol a nebyl uveden na etiketě výrobku (**Tabulka 41**). Cinnamylalkohol je široce používán ve výrobcích běžného denního použití jako vonná látka [171]. Vzorek K19 reprezentuje revitalizační šampón, který spadá do skupiny výrobků typu *rinse-off*. Všechny identifikované látky splňovaly podmínky kosmetické direktivy pro výrobky *rinse-off* (**Tabulka 42**).

Tabulka 38 Vonné alergeny identifikované ve vzorku sprchového gelu K15

Sprchový gel K15		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [µg.g⁻¹]
Benzylalkohol	Benzylalkohol	50,9 ± 2,3
Butylphenyl Methylpropional	Butylphenyl Methylpropional	253,9 ± 2,4
Citronellol	Citronellol	169 ± 3
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	919 ± 53
Limonen	Limonen	4650 ± 479 *
Linalool	Linalool	2146 ± 38 *
Parfum	Cinnamylalkohol	100,0 ± 0,6
	Hydroxycitronellal	18,51 ± 0,14
	Geraniol	2,46 ± 0,23
	α-Isomethyl ionon	3,4 ± 0,3

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 39 Vonné alergeny identifikované ve vzorku sprchového gelu K16

Sprchový gel K16		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [µg.g⁻¹]
Benzylalkohol	Benzylalkohol	651 ± 45

Tabulka 39 Vonné alergenů identifikované ve vzorku sprchového gelu K16 - pokračování

Butylphenyl Methylpropional	Butylphenyl Methylpropional	621 ± 36
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	393 ± 26
Hydroxycitronellal	Hydroxycitronellal	136 ± 13
Lyrál	Lyrál 1	96 ± 6
	Lyrál 2	167 ± 20
Linalool	Linalool	748 ± 8
Limonen	Limonen	567 ± 58
α-Isomethyl ionon	α-Isomethyl ionon	371 ± 24
Parfum	Amylcinnamylalkohol	33,8 ± 2,4
	Citronellol	71,8 ± 1,9
	Geraniol	51 ± 3
	Cinnamal	39,4 ± 2,4
	Eugenol	50 ± 5
	Amylcinnamal	37 ± 3
	Cinnamylalkohol	169 ± 18
	Benzylbenzoát	14,8 ± 0,7

Tabulka 40 Vonné alergenů identifikované ve vzorku sprchového gelu K17

Sprchový gel K17		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [μg·g⁻¹]
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	930 ± 43
Linalool	Linalool	1758 ± 105 *
Citronellol	Citronellol	635 ± 10
Kumarín	Kumarín	178 ± 61
Parfum/Fragrance	Limonen	3,60 ± 0,06
	Hydroxycitronellal	31,2 ± 1,9
	Geraniol	16,7 ± 1,3
	Cinnamylalkohol	34,8 ± 2,3
	Isoeugenol 1	58 ± 12
	Isoeugenol 2	42,3 ± 3,4
	Lilial	13,41 ± 1,13
	α-Isomethyl ionon	7,1 ± 0,8
	Amylcinnamylalkohol	20,00 ± 0,13
	Farnesol 1	39 ± 4
Farnesol 2	93 ± 4	
Farnesol 3	97 ± 5	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 41 Vonné alergeny identifikované ve vzorku sprchového gelu K18

Sprchový gel K18		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Linalool	Linalool	1143 ± 17
Limonen	Limonen	1070 ± 133
Citronellol	Citronellol	492 ± 33
Citral	Citral 1	1404 ± 36 *
	Citral 2	239 ± 19
Parfum	Geraniol	67,5 ± 2,9
	α -Isomethyl ionon	7,27 ± 0,15
	Methyl 2-oktynoát	7 ± 3
	Cinnamylalkohol	111 ± 4
	Lyrál 1	2,73 ± 0,13
	Lyrál 2	3,5 ± 0,3
	Benzylbenzoát	11,1 ± 1,4

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 42 Vonné alergeny identifikované ve vzorku šampónu K19

Šampón revitalizační K19		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Limonen	Limonen	4601 ± 506 *
Linalool	Linalool	1959 ± 129 *
Citral	Citral 1	1750 ± 296 *
	Citral 2	58,27 ± 1,14
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	1708 ± 97 *
Parfum/Fragrance	Methyl 2-oktynoát	5,27 ± 0,23
	Citronellol	4,5 ± 0,4
	Geraniol	40,7 ± 1,3
	α -Isomethyl ionon	6,7 ± 0,6
	Benzylalkohol	18,65 ± 1,5
	Hydroxycitronellal	70,71 ± 1,19
	Cinnamal	16,8 ± 1,6
	Eugenol	82,1 ± 0,3
	Amylcinnamal	17,6 ± 2,6
	Cinnamylalkohol	7,4 ± 0,8

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.1.7 Kosmetické přípravky určené k péči o tělo (antiperspiranty)

Antiperspirant pro ženy K20 a deodorant pro muže K21 jsou také zástupci skupiny výrobků typu *leave-on*. Vzorek K20 původem z Ruska obsahoval dvě látky, které přesáhly ($P < 0,05$) koncentraci $10 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ a nebyly uvedeny na etiketě (**Tabulka 43**). Jednalo se o benzylbenzoát a methyl 2-oktynoát, který je vyroben synteticky a velmi dobře se mísí

s ostatními vonnými substancemi [171]. Deodorant pro muže K21 obsahoval hojnější zastoupení vonných alergenů, přičemž nebyl identifikován benzylsalicylát uvedený na obale produktu. Výrobek měl kořeněnou vůni, což bylo pravděpodobně způsobeno vysokou koncentrací isoeugenolu, která výrazně ($P < 0,05$) překročila legislativně povolenou koncentraci 10 mg.kg^{-1} . Kosmetickou direktivu v tomto výrobku nesplnil ani cinnamylalkohol (*Tabulka 44*). Vzhledem k četnosti vonných alergenů v těchto produktech není vhodné je aplikovat ihned na oholenou pokožku, obzvláště po epilaci.

Tabulka 43 Vonné alergereny identifikované ve vzorku antiperspirantu K20

Antiperspirant pro ženy K20		
Vonné alergereny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergereny	c [$\mu\text{g.g}^{-1}$]
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	148 ± 3
Benzylalkohol	Benzylalkohol	$40,3 \pm 0,4$
Benzylsalicylát	Benzylsalicylát	$44,3 \pm 2,9$
Citral	Citral 1	$33,35 \pm 0,19$
	Citral 2	$90,2 \pm 1,9$
Kumarin	Kumarin	$27,1 \pm 0,5$
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	$10,1 \pm 0,8$
Limonen	Limonen	1091 ± 13
Linalool	Linalool	$978,5 \pm 1,3$
Parfum	Geraniol	$5,40 \pm 0,05$
	Benzylbenzoát	$10,3 \pm 0,4$
	Methyl 2-oktynoát	$32,4 \pm 1,4$
	Amylcinnamal	$3,77 \pm 0,05$

Tabulka 44 Vonné alergereny identifikované ve vzorku deodorantu K21

Deodorant pro muže K21		
Vonné alergereny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergereny	c [$\mu\text{g.g}^{-1}$]
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	59 ± 9
Benzylalkohol	Benzylalkohol	$74,4 \pm 0,4$
Benzylbenzoát	Benzylbenzoát	$19,9 \pm 1,4$
Benzylsalicylát	neidentifikováno	–
Butylphenyl Methylpropional	Lilial	$76,99 \pm 0,23$
Citral	Citral 1	$42,41 \pm 0,18$
	Citral 2	32 ± 3
Citronellol	Citronellol	$99,2 \pm 2,3$
Eugenol	Eugenol	$24,7 \pm 1,9$
Geraniol	Geraniol	65 ± 4
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	413 ± 22
Lyrál	Lyrál 1	$11,5 \pm 0,8$
	Lyrál 2	$37,8 \pm 2,9$
Limonen	Limonen	654 ± 16

Tabulka 44 Vonné alergenů identifikované ve vzorku deodorantu K21 - pokračování

Linalool	Linalool	1633,4 ± 1,6 *
Parfum (Fragrance)	Amylcinnamal	3,57 ± 0,04
	Cinnamylalkohol	18,9 ± 0,9
	Isoeugenol 1	403 ± 9
	Isoeugenol 2	41,6 ± 1,9

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.1.8 Kosmetické přípravky určené k péči o tělo (krémy na ruce)

Vzorky K22 a K23 zastupovaly kosmetické přípravky určené k péči o ruce, tzn. přípravky typu *leave-on*. Vzorek K22 byl v souladu s kosmetickou direktivou, všechny stanovené alergenní látky s koncentrací nad 10 mg.kg⁻¹ byly řádně na obale označeny (**Tabulka 45**).

Na rozdíl od vzorku K22, vzorek K23 obsahoval vonné alergenů o vyšší koncentraci (P<0,05), přičemž amylcinnamylalkohol a geraniol nebyly na etiketě výrobku uvedeny, přestože jejich koncentrace překročila 10 mg.kg⁻¹ (**Tabulka 46**).

Tabulka 45 Vonné alergenů identifikované ve vzorku krému na ruce K22

Krém na ruce K22		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [μg.g⁻¹]
α-Isomethyl ionon	α-Isomethyl ionon	76,9 ± 1,8
Benzylalkohol	Benzylalkohol	54,66 ± 0,27
Lilial	Lilial	30,45 ± 0,15
Citronellol	Citronellol	101,15 ± 0,26
Kumarin	Kumarin	12,9 ± 1,6
Geraniol	Geraniol	8,25 ± 0,04
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	12,9 ± 0,4
Lyrál	Lyrál 1	26,2 ± 0,9
	Lyrál 2	54 ± 3
Limonen	Limonen	286 ± 38
Linalool	Linalool	564 ± 8
Parfum	Methyl 2-oktynoát	4,1 ± 0,4
	Eugenol	8,5 ± 1,4
	Amylcinnamal	5,6 ± 0,6
	Farnesol 1	2,8 ± 0,3
	Farnesol 2	3,92 ± 0,17
	Farnesol 3	3,17 ± 0,12
	Benzylbenzoát	9,6 ± 2,1

Tabulka 46 Vonné alergeny identifikované ve vzorku krému na ruce K23

Krém na ruce K23		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Benzylsalicylát	Benzylsalicylát	2480 \pm 136 *
Limonen	Limonen	2456 \pm 309 *
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	297 \pm 24
Hydroxycitronellal	Hydroxycitronellal	78 \pm 7
Linalool	Linalool	2239 \pm 150 *
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	64,9 \pm 2,4
Citronellol	Citronellol	54 \pm 7
Kumarin	Kumarin	22,6 \pm 1,4
Parfum	Amylcinnamylalkohol	18,5 \pm 0,5
	Methyl 2-oktynoát	5,5 \pm 0,4
	Geraniol	24 \pm 4
	Benzylalkohol	7,3 \pm 1,3
	Lilial	1,7 \pm 0,6
	Cinnamal	2,35 \pm 0,16
	Eugenol	7,5 \pm 0,6
	Amylcinnamal	3,6 \pm 0,9
	Isoeugenol 1	4,0 \pm 0,3
	Isoeugenol 2	4,9 \pm 0,6
	Benzylbenzoát	6,4 \pm 0,7

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.1.9 Kosmetické přípravky určené k péči o tělo (dětské oleje a krémy)

Vzorky kosmetických přípravků K24-28 reprezentovaly dětskou kosmetiku zahrnující oleje, masti a krémy. Výsledky analýzy dvou vzorků dětských olejů K24 a K25 byly velmi rozdílné, vzorek K24 obsahoval vyšší zastoupení vonných alergenů v porovnání se vzorkem K25. Všechny identifikované alergenní vonné látky splňovaly kosmetickou direktivu s výjimkou citralu, který dosahoval poměrně vysoké koncentrace ($P < 0,05$) a nebyl uveden na etiketě výrobku (**Tabulka 47**). Na základě zkušeností spotřebitelů s tímto výrobkem bylo pozorováno podráždění pokožky (opruzeniny, červené skvrny) a také její vysušování [172]. Naopak vzorek K25 obsahoval relativně malý počet vonných alergenů, přičemž stanovenou koncentrační mez $10 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ překročil ($P < 0,05$) pouze α -isomethyl ionon (**Tabulka 48**). Rostlinné oleje používané v kosmetických přípravcích se vyznačují nepříjemným aroma, což je neatraktivní pro spotřebitele. Přídavek vonných látek je tudíž nezbytný. Vzorek K26 reprezentoval dětské tělové mléko s uklidňujícím aroma z levandule, růžového dřeva a jasmínu, který obsahoval kromě vonných alergenů uvedených na obale také benzylbenzoát, geraniol a cinnamylalkohol v koncentracích nad $10 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ($P < 0,05$) (**Tabulka 49**). Obdobně vzorek dětského krému K27 obsahoval citral a α -isomethyl ionon o koncentracích nad $10 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ($P < 0,05$), aniž by byly uvedeny na obale. Na obalu výrobku byl také uveden lyral, který nebyl ve vzorku identifikován (**Tabulka 50**). Identifikované látky ve vzorku K28, jejichž koncentrace se pohybovaly nad legislativně stanovenou koncentrací $10 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$, byly uvedeny na obale výrobku a tudíž byly v souladu s kosmetickou direktivou (**Tabulka 51**).

Tabulka 47 Vonné alergený identifikované ve vzorku dětského oleje K24

Dětský olej K24		
Vonné alergený uvedené na obalu	Identifikované vonné alergený	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Butylphenyl Methylpropional	Butylphenyl Methylpropional	159 ± 3
Hydroxycitronellal	Hydroxycitronellal	138 ± 6
Limonen	Limonen	84 ± 13
Linalool	Linalool	170,8 ± 0,7
Benzylbenzoát	Benzylbenzoát	17,3 ± 1,5
Citronellol	Citronellol	44,4 ± 1,5
Kumarin	Kumarin	33,26 ± 0,06
Geraniol	Geraniol	51,8 ± 1,4
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	36,9 ± 0,7
Parfum	Amylcinnamylalkohol	6,65 ± 0,15
	Methyl 2-oktynoát	2,39 ± 0,03
	Citral 1	35 ± 4
	Citral 2	765 ± 19
	Benzylalkohol	9,80 ± 0,19
	Eugenol	7,2 ± 0,3
	Amylcinnamal	4,59 ± 0,25
	Farnesol 1	3,7 ± 0,5
	Farnesol 2	3,4 ± 0,3
	Farnesol 3	4,48 ± 0,17
	Hexylcinnamal	3,5 ± 0,6

Tabulka 48 Vonné alergený identifikované ve vzorku dětského oleje K25

Dětský olej K25		
Vonné alergený uvedené na obalu	Identifikované vonné alergený	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Parfum	Limonen	6,5 ± 0,4
	Linalool	4,6 ± 0,3
	Citral 2	3,03 ± 0,24
	Citronellol	9,9 ± 0,9
	α -Isomethyl ionon	52 ± 5
	Benzylalkohol	0,370 ± 0,025
	Hydroxycitronellal	4,7 ± 0,3
	Lilial	4,5 ± 0,4
	Amylcinnamal	3,82 ± 0,18
	Cinnamylalkohol	4,3 ± 0,4
	Benzylbenzoát	7,37 ± 0,25

Tabulka 49 Vonné alergenů identifikované ve vzorku tělového mléka K26

Tělové mléko pro děti K26		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Linalool	Linalool	3261 ± 15 *
Limonen	Limonen	140 ± 13
Kumarin	Kumarin	43,46 ± 0,13
Citronellol	Citronellol	10,3 ± 0,5
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	75 ± 8
Benzylalkohol	Benzylalkohol	18,6 ± 2,7
Parfum	Benzylbenzoát	26,9 ± 1,4
	Geraniol	34,7 ± 0,7
	Cinnamylalkohol	13,6 ± 2,1
	Eugenol	6,64 ± 0,24

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 50 Vonné alergenů identifikované ve vzorku dětského krému K27

Dětský krém K27		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Benzylalkohol	Benzylalkohol	128 ± 21
Kumarin	Kumarin	58 ± 4
Lyrál	Lyrál	neidentifikováno
Linalool	Linalool	996 ± 49
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	259 ± 17
Cinnamal	Cinnamal	49,6 ± 5,9
Geraniol	Geraniol	19,5 ± 1,8
Citronellol	Citronellol	102 ± 4
Parfum	Eugenol	4,4 ± 0,5
	Citral 1	5,35 ± 0,06
	Citral 2	1729 ± 118 *
	α -Isomethyl ionon	20,1 ± 2,7

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 51 Vonné alergenů identifikované ve vzorku dětské masti K28

Dětská mast K28		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Amylcinnamal	Amylcinnamal	198 ± 26
Benzylbenzoát	Benzylbenzoát	20,7 ± 2,8
Benzylsalicylát	Benzylsalicylát	25,4 ± 1,8
Citronellol	Citronellol	39 ± 7
Kumarin	Kumarin	15,4 ± 1,3
Eugenol	Eugenol	25 ± 3

Tabulka 51 Vonné alergeny identifikované ve vzorku dětské masti K28 - pokračování

Geraniol	Geraniol	130 ± 25
Hydroxycitronellal	Hydroxycitronellal	58 ± 10
Isoeugenol	Isoeugenol 1	24 ± 3
	Isoeugenol 2	17,8 ± 1,9
Limonen	Limonen	3056 ± 101 *
Linalool	Linalool	1024 ± 184
Parfum	α-Isomethyl ionon	6,0 ± 0,6
	Benzylalkohol	4,6 ± 0,8
	Lilial	5,3 ± 0,4

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.1.10 Avivážní prostředky

Avivážní prostředky určené ke zjemnění tkanin v procesech, které mají sloužit jako doplněk k praní tkanin, se řadí mezi detergenty a jsou regulovány směrnicí č.648/2004 o detergentech, platí pro ně max. povolený limit 100 mg.kg⁻¹. Vzorky detergentů D1 a D3 byly vyrobeny v Belgii a na základě identifikace a kvantifikace vonných alergenů jsou tyto výrobky v souladu s výše uvedenou direktivou s výjimkou citralu, jehož koncentrace ve vzorku D3 přesahovala 100 mg.kg⁻¹ (P<0,05) (**Tabulka 54**). Rakouský vzorek D2 obsahoval kromě uvedených vonných alergenů také řadu dalších látek, mezi kterými přesahoval (P<0,05) legislativně danou koncentrační mez α-isomethyl ionon a cinnamylalkohol (**Tabulka 53**). Parfémované avivážní prostředky aplikované na oděvy mohou být problém především při delším kontaktu oděvu s pokožkou v přítomnosti vlhkosti a tepla [173].

Tabulka 52 Vonné alergeny identifikované ve vzorku aviváže D1

Aviváž D1		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [µg.ml⁻¹]
α-Isomethyl ionon	α-Isomethyl ionon	1250 ± 3 *
Amylcinnamal	Amylcinnamal	3998 ± 102 *
Butylphenyl Methylpropional	Butylphenyl Methylpropional	1472,8 ± 2,5 *
Citronellol	Citronellol	220,2 ± 0,6
Kumarin	Kumarin	194,4 ± 2,9
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	8655 ± 258 *
Limonen	Limonen	790 ± 3
Linalool	Linalool	977,6 ± 2,3
Parfémy	Cinnamylalkohol	77 ± 3
	Isoeugenol 2	5,18 ± 0,05
	Eugenol	7,7 ± 0,8
	Benzylbenzoát	78,0 ± 0,8
	Benzylsalicylát	59 ± 4

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 53 Vonné alergeny identifikované ve vzorku aviváže D2

Aviváž D2		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Benzylsalicylát	Benzylsalicylát	205,1 ± 2,3
Butylphenyl Methylpropional	Butylphenyl Methylpropional	717 ± 29
Kumarin	Kumarin	216 ± 29
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	4348 ± 235 *
Linalool	Linalool	465 ± 8
Parfum	Citronellol	71,9 ± 1,8
	Geraniol	19,5 ± 0,6
	α -Isomethyl ionon	371,9 ± 1,5
	Benzylalkohol	13,8 ± 0,8
	Eugenol	90 ± 3
	Amylcinnamal	12,5 ± 1,3
	Cinnamylalkohol	277 ± 30
	Farnesol 1	9,7 ± 0,7
	Farnesol 2	13,26 ± 0,15
	Farnesol 3	10,5 ± 0,5
	Isoeugenol 1	29,5 ± 2,3
	Isoeugenol 2	14,7 ± 1,4
	Benzylbenzoát	94 ± 13

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 54 Vonné alergeny identifikované ve vzorku aviváže D3

Aviváž D3		
Vonné alergeny uvedené na obalu	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
α -Isomethyl ionon	α -Isomethyl ionon	1394,6 ± 1,4 *
Benzylbenzoát	Benzylbenzoát	1717 ± 31 *
Hexylcinnamal	Hexylcinnamal	5364 ± 542 *
Linalool	Linalool	542 ± 44
Parfum	Citral 1	28,3 ± 2,4
	Citral 2	218 ± 16
	Citronellol	5,8 ± 0,3
	Geraniol	10,9 ± 0,6
	Benzylalkohol	4,6 ± 0,5
	Lilial	13,6 ± 0,7
	Amylcinnamal	87 ± 10
	Cinnamylalkohol	97 ± 8
	Farnesol 1	21,2 ± 1,5
	Farnesol 2	15,1 ± 1,3
	Farnesol 3	14,7 ± 1,3

Tabulka 54 Vonné alergenů identifikované ve vzorku aviváže D3 - pokračování

	Kumarin	24,5 ± 0,9
	Benzylsalicylát	71 ± 5

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.2 Potraviny

Jak bylo uvedeno v kapitole 2.5, potravinářská legislativa zatím použití alergenních vonných látek nereguluje s výjimkou kumarinu. Přídavek vonných látek do potravin je na obale výrobku většinou shrnut pod pojem „aroma“ příp. konkrétněji „jahodové, citrónové, aj. aroma“. U některých výrobků je uveden termín „přírodní aroma“, který je možné podle Nařízení 1334/2008/ES používat jen tehdy, pokud jsou aromatické složky zcela přírodního původu. Kromě toho by měl být označen zdroj těchto látek určených k aromatizaci tak, aby spotřebitelé nebyli uváděni v omyl.

Z našich výsledků je na první pohled patrné (*Tabulky 55-96*), že obsah některých vonných alergenů v potravinách je poměrně vysoký (pokud budeme srovnávat s limitní koncentrací stanovenou pro kosmetické výrobky). Ale vzhledem k tomu, že o možných účincích sledovaných alergenů na lidský organismus po konzumaci je známo jen velmi málo, i při takto vysokých koncentracích se lze pouze dohadovat o jejich negativním působení. Nicméně není vyloučeno, že v budoucnu budou tyto účinky potvrzeny a podobné limity budou zavedeny i v potravinářské legislativě.

5.5.2.1 Sypané čajové směsi

Vzorky S1-S10 (*Tabulka 55-64*) reprezentují sypané aromatizované čaje obsahující různé variace bylin, ovoce a dalších netradičních ingrediencí. Zastoupení vonných alergenů bylo sledováno jak v původní směsi, tak ve výluhu. V čajových směsích jsou obvykle použity sušené části ovoce, koření nebo bylin. Z ovocných složek je v těchto čajích zastoupeno jablko, plody šípku, citrón, pomeranč v podobě kůry a plátků, ale také exotická Goja a papája. Ovocná část je také doplněna přídavkem různorodých bylin (meduňka, vousatka citrónová, zázvor, ženšen), léčivých rostlin (květy šafránu, chrpy, pivoňky, bodláku, slunečnice) a koření (bílý a červený pepř, santalové dřevo nebo skořice).

Všechny vzorky obsahovaly téměř všechny vonné alergenů, které se lišily svými koncentracemi. Ve výluhu byl většinou obsah sledovaných látek významně nižší ($P < 0,05$) než v suché směsi. Výskyt limonenu a linaloolu byl velmi častý, pravděpodobně z důvodu jejich přítomnosti v celé řadě rostlin, bylin a ovoci [158]. Ve všech vzorcích sypaných čajů byl také zastoupen farnesol, který je přítomen v mnoha esenciálních olejích, ale také v květech pomerančovníku, růže, jasmínu nebo lípy [158, 171]. Také benzylsalicylát byl ve všech vzorcích přítomen stejně jako amylcinnamal. Obě tyto látky jsou přítomny v některých kvetoucích rostlinách jako např. karafiáty, hvozdík, jasmín aj [171].

Tabulka 55 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S1

Čaj S1			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Pravý černý čaj, rozinky, kousky pomerančové kůry (min. 6,9 %), plátky mandlí, kousky bílé čokolády, aroma amaretta (min. 1,9 %), aroma, květy šafránu	Limonen	7598 \pm 789 *	12,4 \pm 1,4
	Amylcinnamylalkohol	14258 \pm 869 *	14,2 \pm 1,9
	Linalool	5717 \pm 663 *	2193 \pm 382 *
	Citral 1	38,3 \pm 0,6	11,1 \pm 1,9
	Citral 2	1407 \pm 51 *	141 \pm 12
	Citronellol	60,1 \pm 2,4	6,5 \pm 0,7
	α -Isomethyl ionon	37 \pm 8	51 \pm 6
	Benzylalkohol	24,59 \pm 0,28	16,3 \pm 1,8
	Cinnamal	42 \pm 8	24 \pm 4
	Eugenol	11,3 \pm 2,3	14,7 \pm 2,5
	Isoeugenol 1	97 \pm 15	12,2 \pm 2,3
	Isoeugenol 2	29 \pm 5	3,9 \pm 0,8
	Amylcinnamal	1536 \pm 215 *	1109 \pm 150 *
	Anisalkohol	35 \pm 4	1,22 \pm 0,19
	Cinnamylalkohol	19,2 \pm 1,6	1,5 \pm 0,3
	Farnesol 1	66 \pm 12	31 \pm 5
	Farnesol 2	64 \pm 12	32 \pm 4
	Farnesol 3	84 \pm 16	36 \pm 5
	Hexylcinnamal	68 \pm 7	43,6 \pm 7
	Kumarin	16,9 \pm 2,6	9,0 \pm 1,7
Benzylbenzoát	623 \pm 64	390 \pm 43	
Benzylsalicylát	360 \pm 68	206 \pm 40	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 56 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S2

Čaj S2			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Slupky šípku, kousky jablek, ibišek, guarana (min. 15 %), listy ostružníku a meduňky, vousatka citrónová, aroma	Limonen	1035 \pm 77	58,7 \pm 0,3
	Amylcinnamylalkohol	1711 \pm 87 *	11,99 \pm 0,03
	Linalool	139 \pm 5	42,8 \pm 0,9
	Citral 1	729 \pm 95	209 \pm 13
	Citral 2	1244 \pm 174	364 \pm 11
	Citronellol	6,00 \pm 0,13	6,27 \pm 0,03
	Geraniol	28,2 \pm 2,5	8,58 \pm 0,26
	Benzylalkohol	3,15 \pm 0,21	2,18 \pm 0,07
	Hydroxycitronellal	4,4 \pm 0,6	1,03 \pm 0,13
	Cinnamal	1,72 \pm 0,13	1,43 \pm 0,14
	Eugenol	1,25 \pm 0,21	0,73 \pm 0,15
	Amylcinnamal	24,1 \pm 2,4	56 \pm 4

Tabulka 56 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S2 - pokračování

	Cinnamylalkohol	3,6 ± 0,6	2,17 ± 0,13
	Farnesol 1	13,7 ± 0,7	15,66 ± 0,15
	Farnesol 2	15,0 ± 1,3	14,66 ± 0,15
	Farnesol 3	18,1 ± 0,9	20,5 ± 1,6
	Hexylcinnamal	73,9 ± 1,8	129 ± 9
	Benzylbenzoát	12,1 ± 1,4	13,4 ± 0,9
	Benzylsalicylát	2,7 ± 0,4	4,8 ± 0,6

* mimo stnovený lineární rozsah

Tabulka 57 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S3

Čaj S3			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Mate (min. 82 %), kousky papáji, aroma, plody Goji, kousky malin, kousky divizny, listy ginkga, kousky santalového dřeva, květy chrpy	Limonen	1080 ± 69	neidentifikováno
	Amylcinnamylalkohol	2316 ± 255 *	14,8 ± 2,4
	Linalool	2037 ± 26 *	326 ± 29
	Citral 1	32,98 ± 0,03	4,35 ± 0,3
	Citral 2	50,1 ± 0,6	10,60 ± 0,26
	Citronellol	4,3 ± 0,4	4,51 ± 0,14
	Geraniol	5,1 ± 0,5	2,21 ± 0,08
	α -Isomethyl ionon	18,3 ± 1,2	69 ± 5
	Benzylalkohol	22,4 ± 0,6	8,7 ± 0,4
	Cinnamal	5,95 ± 0,06	4,28 ± 0,07
	Eugenol	24,5 ± 1,7	7,5 ± 0,5
	Isoeugenol 1	70 ± 8	38 ± 5
	Isoeugenol 2	22,2 ± 2,4	11,3 ± 0,7
	Amylcinnamal	740 ± 132	411 ± 49
	Anisalkohol	22,4 ± 2,3	4,8 ± 0,8
	Cinnamylalkohol	13,2 ± 0,8	4,73 ± 0,17
	Farnesol 1	63,3 ± 8,2	31,8 ± 1,4
	Farnesol 2	74 ± 14	33,2 ± 0,4
	Farnesol 3	77 ± 12	36,7 ± 1,8
	Hexylcinnamal	1944 ± 369 *	1131 ± 158
Kumarin	8,8 ± 0,5	2,03 ± 0,26	
Benzylbenzoát	293 ± 47	119 ± 19	
Benzylsalicylát	162 ± 28	49 ± 11	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 58 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S4

Čaj S4			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Pražené mate (min. 68,2 %), kousky zázvoru, aroma, plátky pomeranče, bílý pepř, plody Goji, červený pepř, květy pivoňky, kousky santalového dřeva, chilli papričky, květy bodláku a slunečnice	Limonen	18110 \pm 54 *	69 \pm 4
	Amylcinnamylalkohol	752 \pm 21	8,33 \pm 1,13
	Linalool	1646 \pm 35 *	576 \pm 35
	Citral 1	595 \pm 15	37 \pm 3
	Citral 2	500 \pm 23	49,5 \pm 0,6
	Citronellol	47,9 \pm 0,7	13,6 \pm 0,3
	Geraniol	26,52 \pm 0,22	7,80 \pm 0,03
	α -Isomethyl ionon	22,61 \pm 0,24	10,45 \pm 0,03
	Benzylalkohol	30,6 \pm 0,5	6,27 \pm 0,04
	Hydroxycitronellal	6,3 \pm 1,4	6,49 \pm 0,19
	Cinnamal	3130 \pm 88 *	789 \pm 50
	Eugenol	2362 \pm 68 *	437 \pm 10
	Isoeugenol 1	150 \pm 13	101,5 \pm 0,3
	Isoeugenol 2	92 \pm 4	54,3 \pm 2,8
	Amylcinnamal	706 \pm 83	552 \pm 3
	Anisalkohol	7,7 \pm 0,8	3,87 \pm 0,14
	Cinnamylalkohol	663 \pm 9	53,4 \pm 0,7
	Farnesol 1	49 \pm 3	44,4 \pm 1,3
	Farnesol 2	49 \pm 3	44,6 \pm 0,7
	Farnesol 3	67 \pm 5	55,8 \pm 1,5
Hexylcinnamal	2257 \pm 217 *	1453 \pm 35 *	
Kumarin	8,9 \pm 0,4	4,25 \pm 0,07	
Benzylbenzoát	396 \pm 17	213 \pm 8	
Benzylsalicylát	216 \pm 6	120 \pm 10	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 59 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S5

Čaj S5			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Černý čaj Pu-Ehr (min. 85,2 %), šípkové oplodí, kousky jablka, zelené mate, aroma, vousatka citrónová	Limonen	7594 \pm 917 *	1249 \pm 213
	Amylcinnamylalkohol	475 \pm 67	21 \pm 3
	Linalool	272 \pm 7	150 \pm 13
	Citral 1	30 \pm 4	9,5 \pm 1,5
	Citral 2	289 \pm 4	32 \pm 6
	Citronellol	3,19 \pm 0,08	2,03 \pm 0,08
	Geraniol	19,28 \pm 1,6	6,1 \pm 1,3
	α -Isomethyl ionon	29 \pm 4	18 \pm 3
	Benzylalkohol	14,9 \pm 2,6	7,4 \pm 1,5
	Hydroxycitronellal	8,2 \pm 0,8	7,85 \pm 0,13

Tabulka 59 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S5 - pokračování

Cinnamal	8,2 ± 1,9	6,7 ± 1,5
Eugenol	4,7 ± 0,9	3,6 ± 0,6
Isoeugenol 1	62 ± 12	58 ± 10
Isoeugenol 2	19,7 ± 1,4	26,2 ± 2,6
Amylcinnamal	517 ± 93	350 ± 49
Anisalkohol	5,5 ± 1,3	3,8 ± 0,5
Cinnamylalkohol	7,1 ± 1,5	2,5 ± 0,4
Farnesol 1	60 ± 11	24 ± 4
Farnesol 2	58 ± 6	23 ± 3
Farnesol 3	69 ± 12	27 ± 4
Hexylcinnamal	1345 ± 230 *	1496 ± 224 *
Kumarin	6,9 ± 0,7	3,4 ± 0,4
Benzylbenzoát	230 ± 51	135 ± 19
Benzylsalicylát	122 ± 14	61 ± 7

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 60 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S6

Čaj S6			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Rooibos (min. 76,2 %), kousky pomerančové kůry (min. 5,7 %) a papáje, aroma, červený pepř, kousky santalového dřeva, zázvoru (min. 1,9 %) a ženšenu, květy pomerančovníku, chrpy a levandule	Limonen	13917 ± 2641 *	57,5 ± 2,3
	Amylcinnamylalkohol	1585 ± 284 *	29 ± 3
	Linalool	2307 ± 21 *	1927 ± 46 *
	Citral 1	334 ± 36	87 ± 5
	Citral 2	598 ± 42	224 ± 39
	Citronellol	9,1 ± 1,3	6,87 ± 1,13
	Geraniol	13,3 ± 2,7	40,5 ± 1,4
	α -Isomethyl ionon	11,5 ± 2,1	21,6 ± 2,9
	Benzylalkohol	23,1 ± 2,8	9,1 ± 1,3
	Hydroxycitronellal	18 ± 3	10,3 ± 1,6
	Cinnamal	4,3 ± 0,8	7,3 ± 0,8
	Eugenol	5,2 ± 0,6	4,1 ± 0,6
	Isoeugenol 1	59 ± 6	77 ± 8
	Isoeugenol 2	22,9 ± 2,2	42 ± 8
	Amylcinnamal	350 ± 59	546 ± 70
	Anisalkohol	4,4 ± 0,5	5,4 ± 0,9
	Cinnamylalkohol	3,26 ± 0,24	3,1 ± 0,4
	Farnesol 1	51 ± 7	50 ± 5
	Farnesol 2	48 ± 7	49 ± 9
	Farnesol 3	59 ± 9	56 ± 10
Hexylcinnamal	748 ± 68	1036 ± 114	
Kumarin	4,3 ± 0,3	3,8 ± 0,5	
Benzylbenzoát	218 ± 39	162 ± 21	
Benzylsalicylát	108 ± 13	91 ± 14	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 61 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S7

Čaj S7			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Rooibos (min. 79,9 %), kousky citrónové kůry, aroma, kousky skořice (min. 3,1 %)	Limonen	6936 ± 1039 *	12,6 ± 1,9
	Amylcinnamylalkohol	583 ± 33	10,8 ± 1,9
	Linalool	1120 ± 45	970 ± 68
	Citral 1	393 ± 12	105 ± 8
	Citral 2	394 ± 10	156 ± 14
	Citronellol	7,20 ± 0,23	3,41 ± 1,20
	Geraniol	10,2 ± 0,4	10,94 ± 0,04
	α -Isomethyl ionon	7,72 ± 0,24	8,8 ± 0,9
	Cinnamal	2918 ± 114 *	2340 ± 44 *
	Eugenol	854 ± 48	571 ± 10
	Isoeugenol 1	76 ± 3	90 ± 5
	Isoeugenol 2	48 ± 5	53,9 ± 2,5
	Amylcinnamal	260 ± 8	376 ± 36
	Anisalkohol	neidentifikováno	2,38 ± 0,09
	Cinnamylalkohol	27,6 ± 2,5	19 ± 4
	Farnesol 1	16,8 ± 1,7	31 ± 4
	Farnesol 2	17,3 ± 1,8	31 ± 5
	Farnesol 3	23 ± 3	38 ± 4
	Hexylcinnamal	797 ± 87	1187 ± 112 *
	Kumarin	3,3 ± 0,4	4,3 ± 0,5
Benzylbenzoát	190 ± 18	209 ± 19	
Benzylsalicylát	106 ± 8	106 ± 8	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 62 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S8

Čaj S8			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Rooibos (min. 81,9 %), rakytník řešetlákový (min. 10,2 %), aroma, květa slunečnice a bodláku	Limonen	11174 ± 1665 *	1176 ± 218
	Amylcinnamylalkohol	15138 ± 53 *	16,4 ± 1,6
	Linalool	563 ± 5	296 ± 3
	Citral 1	385 ± 11	173,4 ± 1,7
	Citral 2	587 ± 31	249,0 ± 1,7
	Citronellol	11,7 ± 0,9	4,06 ± 0,19
	Geraniol	44 ± 5	20,0 ± 0,7
	α -Isomethyl ionon	11,49 ± 0,13	5,6 ± 0,3
	Hydroxycitronellal	6,13 ± 0,27	0,97 ± 0,02
	Cinnamal	3,75 ± 0,25	1,87 ± 0,14

Tabulka 62 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S8 - pokračování

	Isoeugenol 1	5,7 ± 0,7	4,4 ± 0,4
	Isoeugenol 2	0,53 ± 0,03 **	neidentifikováno
	Amylcinnamal	46,49 ± 2,3	86 ± 14
	Farnesol 1	3,51 ± 0,26	neidentifikováno
	Farnesol 2	4,0 ± 0,9	neidentifikováno
	Farnesol 3	4,7 ± 0,5	neidentifikováno
	Hexylcinnamal	125 ± 7	75 ± 7
	Benzylbenzoát	35,3 ± 2,3	16,5 ± 2,8
	Benzylsalicylát	18,33 ± 1,6	3,63 ± 0,27

* mimo stanovený lineární rozsah

** < LOQ

Tabulka 63 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S9

Čaj S9			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [µg.g ⁻¹] v suché směsi	c [µg.ml ⁻¹] ve výluhu
Černý čaj, květy růže (min. 3 %), rozinky, kousky meruňky a manga, aroma	Limonen	1211 ± 127	18,3 ± 1,3
	Amylcinnamylalkohol	7157 ± 73 *	5,8 ± 0,8
	Linalool	268 ± 5	46,9 ± 1,4
	Citral 1	43 ± 7	4,9 ± 1,3
	Citral 2	514 ± 18	66,2 ± 1,8
	Citronellol	10,86 ± 0,03	2,14 ± 0,14
	Geraniol	335 ± 7	10,4 ± 2,3
	α-Isomethyl ionon	14,4 ± 0,8	8,4 ± 0,6
	Benzylalkohol	245,4 ± 2,4	9,58 ± 0,06
	Cinnamal	8,1 ± 0,6	4,0 ± 0,3
	Isoeugenol 1	7,8 ± 1,3	5,4 ± 0,4
	Isoeugenol 2	1,66 ± 0,09	0,68 ± 0,06
	Amylcinnamal	59 ± 6	45,3 ± 0,7
	Cinnamylalkohol	5,89 ± 0,25	2,67 ± 0,03
	Farnesol 1	47,8 ± 2,6	37,1 ± 0,4
	Farnesol 2	51,7 ± 2,8	34,3 ± 1,7
	Farnesol 3	66 ± 3	46 ± 4
	Hexylcinnamal	175 ± 22	130 ± 10
Benzylbenzoát	50 ± 5	31,3 ± 1,6	
Benzylsalicylát	19,9 ± 1,8	17,4 ± 1,3	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 64 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje S10

Čaj S10			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Pravý černý čaj, plátky citrónu, vousatka citrónová, přírodní aroma, kousky zázvoru, pepř bílý, květy kaktusu, červený pepř, kousky santalového dřeva, listy Aloe, květy bodláku	Limonen	14470 \pm 331 *	8,5 \pm 0,9
	Amylcinnamylalkohol	4901 \pm 113 *	94 \pm 18
	Linalool	586 \pm 11	138,9 \pm 2,3
	Citral 1	12852,23 \pm 166 *	2070 \pm 41 *
	Citral 2	12334 \pm 178 *	2595 \pm 60 *
	Citronellol	114,1 \pm 1,9	12,6 \pm 2,3
	Geraniol	62,1 \pm 1,7	13,74 \pm 0,07
	α -Isomethyl ionon	40,82 \pm 0,28	30 \pm 4
	Benzylalkohol	9,67 \pm 0,08	3,65 \pm 0,15
	Hydroxycitronellal	4,9 \pm 0,4	neidentifikováno
	Cinnamal	18,1 \pm 2,9	74 \pm 15
	Eugenol	2,41 \pm 0,23	1,67 \pm 0,29
	Isoeugenol 1	23,2 \pm 2,7	15,9 \pm 0,8
	Isoeugenol 2	19,2 \pm 2,3	2,3 \pm 0,3
	Amylcinnamal	132 \pm 6	139 \pm 8
	Farnesol 1	10,4 \pm 1,5	9,8 \pm 0,6
	Farnesol 2	11,55 \pm 0,09	10,6 \pm 0,5
	Farnesol 3	14,8 \pm 0,8	12,7 \pm 0,8
	Hexylcinnamal	435 \pm 26	345 \pm 4
	Benzylbenzoát	88 \pm 6	69 \pm 3
Benzylsalicylát	47 \pm 5	32,2 \pm 0,9	

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.2.2 Čajové směsi porcované

Vzorky P1-P6 (*Tabulka 65-70*) reprezentují porcované čajové směsi v sušené formě popř. v instantním prášku. Zastoupení vonných alergenů bylo opět sledováno jak v původní směsi, tak ve výluhu. Jako v případě sypaných čajových směsí, i vzorky porcovaných čajů obsahovaly téměř stejné zastoupení vonných alergenů lišící se v koncentraci, ve výluhu byl většinou obsah sledovaných látek významně nižší ($P < 0,05$) než v suché směsi.

Čaj je většinou složen z přírodních surovin, které jsou samy o sobě velmi bohaté na vonné látky. Mezi nejčastěji se vyskytujícími vonnými alergeny byly: limonen, amylcinnamylalkohol, linalool, citral, amylcinnamal, α -isomethyl ionon, benzylbenzoát. Všechny vyjmenované látky se používají do syntetických aromat, většina z nich je přirozenou součástí různých rostlin, popř. ovoce. Benzylbenzoát může kromě hořkosladké chuti působit i jako stabilizátor syntetických příchutí [171]. Benzylalkohol dodává nasládlou mandlově ovocnou vůni, používá se do aromat peckovitého ovoce a v přírodě se nachází v jasmínu a pomerančových květech. Čaj je složen většinou z přírodních surovin, které jsou samy o sobě velmi bohaté na vonné látky [158, 171].

Tabulka 65 Vonné alergenů identifikované ve vzorku čaje P1

Čaj P1			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Jablko 29 %, ibišek 28 %, švestky 17 %, černý rybíz 13 %, ostružiny 10 %, ovocné aroma 3 %	Limonen	2013 \pm 48 *	6,12 \pm 0,25
	Amylcinnamylalkohol	4278 \pm 73 *	10,1 \pm 1,6
	Linalool	154 \pm 6	28 \pm 3
	Citral 1	4,07 \pm 0,15	Neidentifikován
	Citral 2	28,6 \pm 1,4	3,44 \pm 0,09
	α -Isomethyl ionon	7,48 \pm 0,27	15 \pm 4
	Benzylalkohol	6,8 \pm 0,3	1,31 \pm 0,04
	Cinnamal	8,0 \pm 1,4	5,4 \pm 0,6
	Eugenol	2,41 \pm 0,05	neidentifikován
	Amylcinnamal	3,37 \pm 0,24	3,6 \pm 0,3
	Benzylbenzoát	4,59 \pm 0,29	3,18 \pm 0,17

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 66 Vonné alergenů identifikované ve vzorku čaje P2

Čaj P2			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Přírodní aroma	Limonen	171,9 \pm 1,3	1,10 \pm 0,03
	Linalool	10,23 \pm 0,07	6,96 \pm 0,17
	Citral 1	16,7 \pm 0,6	69,7 \pm 2,8
	Citral 2	14,8 \pm 1,5	12,2 \pm 1,9
	Citronellol	0,220 \pm 0,005	3,1 \pm 0,7
	α -Isomethyl ionon	15,3 \pm 2,7	4,4 \pm 0,4
	Amylcinnamal	3,5 \pm 0,8	4,2 \pm 1,8
	Benzylbenzoát	3,8 \pm 0,9	4,8 \pm 1,3

Tabulka 67 Vonné alergenů identifikované ve vzorku čaje P3

Čaj P3			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Ibišek, jablko, černý rybíz, švestka, aroma	Limonen	3236,89 \pm 454 *	5,5 \pm 0,6
	Amylcinnamylalkohol	2366 \pm 355 *	neidentifikován
	Linalool	133 \pm 13	14,7 \pm 1,5
	Citral 1	2,9 \pm 0,5	neidentifikován
	Citral 2	114 \pm 11	15,5 \pm 0,4
	α -Isomethyl ionon	31 \pm 7	21 \pm 5
	Benzylalkohol	3,9 \pm 0,4	0,71 \pm 0,07
	Cinnamal	6,9 \pm 1,6	neidentifikován
Eugenol	3,48 \pm 0,27	5,8 \pm 0,6	

Tabulka 67 Vonné alergenů identifikované ve vzorku čaje P3 - pokračování

	Amylcinnamal	3,4 ± 0,8	3,9 ± 0,9
	Benzylbenzoát	4,8 ± 0,9	4,8 ± 1,3

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 68 Vonné alergenů identifikované ve vzorku čaje P4

Čaj P4			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [μg.g⁻¹] v suché směsi	c [μg.ml⁻¹] ve výluhu
Brusinkové, pomerančové, citrónové aroma	Limonen	1194 ± 176	38 ± 3
	Amylcinnamylalkohol	2377 ± 49 *	49,2 ± 1,8
	Linalool	692 ± 110	496 ± 54
	Citral 1	2,8 ± 0,3	10,79 ± 1,15
	Citral 2	305 ± 32	549 ± 49
	Geraniol	13,7 ± 1,9	2,5 ± 0,3
	α-Isomethyl ionon	5,6 ± 0,6	4,8 ± 0,5
	Benzylalkohol	5,2 ± 0,9	2,7 ± 0,3
	Cinnamal	4,04 ± 0,05	0,46 ± 0,04
	Eugenol	22,8 ± 1,5	1,69 ± 0,09
	Amylcinnamal	6,7 ± 1,3	4,1 ± 0,6
	Kumarin	10,52 ± 0,14	neidentifikován
	Benzylbenzoát	10,37 ± 0,09	4,7 ± 0,9

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 69 Vonné alergenů identifikované ve vzorku čaje P5

Čaj P5			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [μg.g⁻¹] v suché směsi	c [μg.ml⁻¹] ve výluhu
Přírodní citrónové aroma	Limonen	171 ± 9	38,4 ± 2,8
	Linalool	4,28 ± 0,06	12,10 ± 1,4
	Citral 1	1,45 ± 0,03	795 ± 65
	Citral 2	7,90 ± 0,09	1156 ± 117
	Citronellol	neidentifikován	4,4 ± 0,9
	Geraniol	5,3 ± 0,4	5,7 ± 0,7
	α-Isomethyl ionon	1,89 ± 0,24	8,1 ± 0,5
	Cinnamal	0,160 ± 0,008	neidentifikován
	Eugenol	2,1 ± 0,4	neidentifikován
	Amylcinnamal	3,6 ± 0,7	3,93 ± 0,09
Benzylbenzoát	3,94 ± 0,28	3,6 ± 0,4	

Tabulka 70 Vonné alergeny identifikované ve vzorku čaje P6

Čaj P6			
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$] v suché směsi	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$] ve výluhu
Aroma	Limonen	3,10 ± 0,17	30,2 ± 2,6
	Amylcinnamylalkohol	250 ± 33	25,3 ± 1,4
	Linalool	8,3 ± 0,8	18,7 ± 0,6
	Citral 1	9,3 ± 0,7	111 ± 17
	Citral 2	10,57 ± 1,15	159 ± 28
	Citronellol	0,88 ± 0,09 **	4,9 ± 0,3
	Amylcinnamal	3,54 ± 0,28	3,65 ± 0,25
	Benzylbenzoát	8,8 ± 0,6	neidentifikováno

** < LOQ

5.5.2.3 Želatinové bonbóny

Vzorky B1-B10 reprezentovaly různé druhy želatinových bonbónů pocházející od různých výrobců. Na obale zmíněných produktů byly kromě termínů „aroma“ také mnohdy uvedeny koncentráty (ovocné, rostlinné) a extrakty, které také do jisté míry přispívají danému flavouru, i když plní funkci barviv. Alergení vonné látky se ve většině případů vyskytují v rostlinách. Přítomnost ovocných koncentrátů a extraktů v želatinových bonbónech proto nevyklučuje přítomnost vonných alergenů v těchto produktech. Téměř ve všech vzorcích byly identifikovány vonné alergeny jako je limonen, linalool, amylcinnamylalkohol, methyl 2-oktynoát, α -isomethyl ionon, benzylalkohol a benzylbenzoát.

Benzylbenzoát pravděpodobně působí v těchto produktech jako stabilizátor syntetických příchutí a benzylalkohol je přidáván jako aditivum. Častý výskyt methyl 2-oktynoátu nebyl překvapující, protože se využívá do aromat jako je např. jahoda [158]. Pro většinu želatinových bonbónů je charakteristické právě jahodové aroma. Také amylcinnamal a amylcinnamylalkohol se přidávají do různých cukrovinek ke zlepšení nebo zvýraznění chuti. Relativně vysoké koncentrace amylcinnamylalkoholu byly stanoveny ve vzorcích B1, B2, B3 a B10. Nejvyšší koncentrace byla stanovena u limonenu ve vzorku B9. Limonen je velmi rozšířenou vonnou látkou, využívá se také k výrobě syntetických vonných látek. Identifikované vonné alergeny a jejich koncentrace jsou uvedeny v **Tabulkách 71-80**.

Tabulka 71 Vonné alergeny identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B1

Želatinové bonbóny B1		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Jahodové aroma, extrakt černé mrkve	Limonen	9,1 ± 0,9
	Amylcinnamyl alkohol	3432 ± 62 *
	Linalool	109,4 ± 0,6
	Methyl 2-oktynoát	1,20 ± 0,19
	Geraniol	0,43 ± 0,06
	α -Isomethyl ionon	1,193 ± 0,004
	Benzylalkohol	0,73 ± 0,09

Tabulka 71 Vonné alergeny identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B1 - pokračování

	Amylcinnamal	3,3 ± 0,4
	Anisalkohol	1,26 ± 0,13
	Benzylbenzoát	3,4 ± 0,4

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 72 Vonné alergeny identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B2

Želatinové bonbóny B2		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma, ovocné a zeleninové koncentráty (jablko, rajče, ředkev, dýně)	Limonen	66 ± 27
	Amylcinnamylalkohol	1021 ± 75 *
	Linalool	11,0 ± 0,4
	Methyl 2-oktynoát	1,71 ± 0,09
	Citral 1	neidentifikováno
	Citral 2	2,09 ± 0,23
	α -Isomethyl ionon	0,83 ± 0,16
	Benzylalkohol	0,94 ± 0,09

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 73 Vonné alergeny identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B3

Želatinové bonbóny B3		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Ovocné koncentráty 15 % (jablečný, třešňový, borůvkový, malinový), rostlinné koncentráty a extrakty (černá mrkev, mrkev, ibišek), aromata (jahodové, borůvkové, višňové, malinové)	Limonen	63 ± 7
	Amylcinnamylalkohol	1874 ± 290 *
	Linalool	1282 ± 192 *
	Methyl 2-oktynoát	2,401 ± 0,007
	Citral 1	2,9 ± 0,3
	Citral 2	164 ± 22
	α -Isomethyl ionon	9,7 ± 0,6
	Benzylalkohol	25,9 ± 1,4
	Eugenol	5,7 ± 0,3
	Benzylbenzoát	1,92 ± 0,23

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 74 Vonné alergeny identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B4

Želatinové bonbóny B4		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma	Limonen	2,9 ± 0,5
	Amylcinnamylalkohol	43 ± 7
	Linalool	5,3 ± 0,9
	Methyl 2-oktynoát	1,56 ± 0,13

Tabulka 74 Vonné alergeny identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B4 - pokračování

	Citral 1	neidentifikováno
	Citral 2	3,5 ± 0,6
	Geraniol	0,42 ± 0,07
	α-Isomethyl ionon	2,9 ± 0,5
	Benzylalkohol	3,84 ± 0,05
	Amylcinnamal	3,3 ± 0,7
	Benzylbenzoát	1,77 ± 0,23

Tabulka 75 Vonné alergeny identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B5

Želatinové bonbóny B5		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [μg.g⁻¹]
Aroma	Limonen	3,9 ± 0,9
	Amylcinnamylalkohol	69 ± 14
	Linalool	7,1 ± 1,4
	Methyl 2-oktynoát	1,51 ± 0,14
	Citral 1	neidentifikováno
	Citral 2	3,25 ± 0,27
	Geraniol	0,58 ± 0,05
	α-Isomethyl ionon	2,2 ± 0,4
	Benzylalkohol	6,6 ± 1,5
	Amylcinnamal	3,4 ± 0,6
	Kumarin	0,39 ± 0,06 **
	Benzylbenzoát	3,9 ± 0,4

** < LOQ

Tabulka 76 Vonné alergeny identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B6

Želatinové bonbóny B6		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [μg.g⁻¹]
3% ovocná dřev (jablko), ovocná šťáva z koncentrátu ovocné šťávy (jahoda, malina), ovocné a zeleninové koncentráty (mrkev, jablko, kořen černé mrkve, dýně, borůvka, třešně, citrón, červené zelí), přírodní aroma	Limonen	129 ± 6
	Amylcinnamylalkohol	220 ± 31
	Linalool	73 ± 18
	Citral 1	2,44 ± 0,19
	Citral 2	31 ± 5
	Citronellol	0,719 ± 0,07
	Geraniol	0,84 ± 0,04
	α-Isomethyl ionon	1,59 ± 0,06
	Benzylalkohol	77 ± 8
	Amylcinnamal	3,26 ± 0,13
	Anisalkohol	0,909 ± 0,018
	Cinnamylalkohol	0,83 ± 0,03
	Benzylbenzoát	2,69 ± 0,27

Tabulka 77 Vonné alergenů identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B7

Želatinové bonbóny B7		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma (citrónové, pomerančové, jablečné, jahodové)	Limonen	80 ± 15
	Amylcinnamylalkohol	152 ± 20
	Linalool	24,9 ± 0,6
	Citral 1	30,4 ± 2,4
	Citral 2	82 ± 14
	Citronellol	1,150 ± 0,007
	Geraniol	52 ± 8
	Benzylalkohol	3,8 ± 0,6
	Cinnamal	1,39 ± 0,24
	Eugenol	1,9 ± 0,3
	Anisalkohol	0,712 ± 0,071
Benzylbenzoát	5,7 ± 0,6	

Tabulka 78 Vonné alergenů identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B8

Želatinové bonbóny B8		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Jablečná šťáva z jablečného koncentrátu (6% hm.), výtažky z ovoce a zeleniny (citrón, saflor, hrozny, borůvky, jablko), brusinkový koncentrát, přírodní aroma, přírodní pomerančové aroma	Limonen	153 ± 5
	Amylcinnamylalkohol	136 ± 26
	Linalool	133 ± 20
	Citral 1	3,8 ± 0,4
	Citral 2	7,7 ± 0,9
	Citronellol	1,8 ± 0,3
	Geraniol	14,7 ± 0,9
	α -Isomethyl ionon	2,41 ± 0,25
	Benzylalkohol	1,24 ± 0,13
	Eugenol	2,9 ± 0,5
	Amylcinnamal	3,26 ± 0,24
	Cinnamal	0,22 ± 0,03
	Cinnamylalkohol	1,98 ± 0,15

Tabulka 79 Vonné alergenů identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B9

Želatinové bonbóny B9		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aromata (tutti frutti, vanilka), extrakt světlice barvířské	Limonen	5316 ± 526 *
	Amylcinnamylalkohol	99 ± 13
	Linalool	55 ± 3
	Methyl 2-oktynoát	1,72 ± 0,05

Tabulka 79 Vonné alergenů identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B9 - pokračování

	Citral 1	4,3 ± 0,9
	Citral 2	18,2 ± 2,7
	Citronellol	1,6 ± 0,4
	Geraniol	2,4 ± 0,4
	α-Isomethyl ionon	2,8 ± 0,5
	Benzylalkohol	8,68 ± 0,15
	Eugenol	1,62 ± 0,27
	Amylcinnamal	3,25 ± 0,23
	Cinnamylalkohol	1,19 ± 0,16
	Benzylbenzoát	3,2 ± 0,5

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 80 Vonné alergenů identifikované ve vzorku želatinových bonbónů B10

Želatinové bonbóny B10		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma	Limonen	7,6 ± 1,3
	Amylcinnamylalkohol	897 ± 108
	Linalool	34 ± 6
	Methyl 2-oktynoát	3,3 ± 0,3
	Citral 1	neidentifikováno
	Citral 2	1,55 ± 0,03
	Citronellol	0,44 ± 0,05 **
	α-Isomethyl ionon	4,9 ± 0,9
	Benzylalkohol	7,6 ± 0,5
	Hydroxycitronellal	1,61 ± 0,23
	Benzylbenzoát	1,49 ± 0,24

** < LOQ

5.5.2.4 Ovocné žvýkácké gummy

Vzorky různých ovocných žvýkaček G1-G5 měly na svém obalu většinou uveden jen termín „aroma“, což pravděpodobně vypovídá o syntetických aromatech. I v těchto vzorcích byl hojně zastoupen limonen a linalool. U vzorku G5, který se vyznačoval silnou citrusovou vůní, byla stanovená koncentrace limonenu dokonce nejvyšší. Limonen se vyznačuje svěží citrusovou vůní a využívá se na výrobu syntetických vonných látek, proto je nejspíš jeho koncentrace ve vzorku G5 vysoká (**Tabulka 85**). Kromě limonenu a linaloolu, byl v těchto produktech často zastoupen amylcinnamylalkohol, který patří mezi časté ovocné příchutě využívané v potravinářství, a také cinnamal, který se využívá především v těchto typech produktů ke zvýraznění chuti [171]. Identifikované vonné alergenů a jejich koncentrace ve vzorcích G1-G5 jsou shrnuty v níže přiložených **Tabulkách 81-85**.

Tabulka 81 Vonné alergeny identifikované ve vzorku žvýkáci gummy G1

Žvýkáci guma G1		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma, ovocné šťávy 3% (kiwi, ostružina, jahoda)	Limonen	164 ± 7
	Amylcinnamylalkohol	2867 ± 80 *
	Linalool	68,56 ± 1,16
	Citral 1	7,63 ± 0,28
	Citral 2	580,5 ± 0,9
	Geraniol	13,9 ± 1,9
	α -Isomethyl ionon	19,9 ± 0,8
	Benzylalkohol	2,67 ± 0,03
	Cinnamal	483 ± 4
	Eugenol	4,3 ± 0,4
	Amylcinnamal	10,3 ± 1,4

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 82 Vonné alergeny identifikované ve vzorku žvýkáci gummy G2

Žvýkáci guma G2		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma	Limonen	78,5 ± 1,9
	Amylcinnamylalkohol	3191 ± 13 *
	Linalool	30,1 ± 0,3
	Citral 2	1498 ± 54 *
	Citronellol	3,51 ± 0,23
	α -Isomethyl ionon	3,36 ± 0,15
	Benzylalkohol	10,49 ± 0,18
	Cinnamal	213 ± 12
	Eugenol	13 ± 4
	Isoeugenol 1	23 ± 4
	Isoeugenol 2	3,7 ± 0,6
	Amylcinnamal	8,88 ± 1,15
	Anisalkohol	6,69 ± 1,13
	Cinnamylalkohol	6,5 ± 0,9
	Kumarin	3,0 ± 0,6
Benzylbenzoát	173 ± 3	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 83 Vonné alergeny identifikované ve vzorku žvýkáci gummy G3

Žvýkáci guma G3		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma	Limonen	524 ± 21

Tabulka 83 Vonné alergenů identifikované ve vzorku žvýkácké gumy G3 - pokračování

	Amylcinnamylalkohol	1085 ± 4 *
	Linalool	9,7 ± 1,4
	Citral 1	9,12 ± 0,18
	Citral 2	7,0 ± 1,7
	Geraniol	2,6 ± 0,8
	Hydroxycitronellal	2,89 ± 0,16
	Cinnamal	118 ± 12
	Amylcinnamal	3,47 ± 0,23
	Cinnamylalkohol	0,92 ± 0,18

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 84 Vonné alergenů identifikované ve vzorku žvýkácké gumy G4

Žvýkácká guma G4		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma	Limonen	211 ± 15
	Amylcinnamylalkohol	679 ± 34
	Linalool	25,9 ± 0,3
	Citral 1	13,83 ± 0,18
	Citral 2	898 ± 36
	Geraniol	30 ± 3
	Benzylalkohol	19,5 ± 1,3
	Cinnamal	315 ± 3
	Eugenol	5,2 ± 0,6

Tabulka 85 Vonné alergenů identifikované ve vzorku žvýkácké gumy G5

Žvýkácká guma G5		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Aroma	Limonen	11580 ± 405 *
	Amylcinnamylalkohol	165,7 ± 2,3
	Linalool	444,7 ± 1,3
	Citral 1	916 ± 49
	Citral 2	992 ± 59
	Citronellol	11,22 ± 0,25
	Benzylalkohol	13,42 ± 1,14
	Cinnamal	11,30 ± 0,03
	Amylcinnamal	3,53 ± 0,29
	Anisalkohol	0,95 ± 0,06
	Benzylbenzoát	4,9 ± 0,3

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.2.5 Alkoholické a nealkoholické nápoje

Vzorky N1-N6 reprezentovaly různé ovocné alkoholické nápoje zahrnující ovocné kvašené sladové nápoje a ovocné likéry, vzorky N7-N11 představovaly nealkoholické nápoje pro děti zahrnující ovocné party drinky a různě ochucené ovocné nápoje.

Jelikož se jedná o ovocné nápoje, byly ve všech vzorcích opět nalezeny limonen, linalool a amylcinnamylalkohol. Vysoká koncentrace limonenu byla podle očekávání nalezena ve vzorku N10, z důvodu přítomnosti pomerančové šťávy. Limonen se také vyskytuje v jiných citrusových plodech, jako jsou grapefruity, citróny, limetky, což pravděpodobně vysvětluje jeho přítomnost ve vzorku N6, kde byl spíše očekáván citral z důvodu deklarovaného přírodního citrónového aroma. Do ovocných aromat se také využívá farnesol, který byl identifikován ve vzorcích N1, N2 a N9. Ve všech vzorcích nápojů se také vyskytoval amylcinnamal, který se v potravinářství využívá běžně ke zlepšení nebo zvýraznění chuti, a také benzylbenzoát pravděpodobně ve funkci stabilizátoru syntetických příchutí [171]. Zastoupení vonných alergenů a jejich koncentrace ve vzorcích N1-N11 jsou uvedeny v *Tabulkách 86-96*.

Tabulka 86 Vonné alergenů identifikované ve vzorku nápoje N1

Nápoj N1		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Hruškový koncentrát, aroma	Limonen	172,49 ± 0,26
	Linalool	27 ± 6
	Methyl 2-oktynoát	2,6 ± 0,8
	α -Isomethyl ionon	7,6 ± 1,4
	Benzylalkohol	260 ± 21
	Cinnamal	4,25 ± 0,08
	Isoeugenol 1	8,2 ± 1,3
	Isoeugenol 2	0,315 ± 0,021 **
	Amylcinnamal	3,4 ± 0,8
	Anisalkohol	0,71 ± 0,04
	Farnesol 1	1,11 ± 0,27
	Farnesol 2	1,17 ± 0,23
	Farnesol 3	0,660 ± 0,006 **
Benzylbenzoát	5,5 ± 0,3	

** < LOQ

Tabulka 87 Vonné alergenů identifikované ve vzorku nápoje N2

Nápoj N2		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Aroma	Limonen	15,3 ± 0,9
	Amylcinnamylalkohol	62 ± 5
	Linalool	17 ± 5
	α -Isomethyl ionon	128 ± 7

Tabulka 87 Vonné alergenů identifikované ve vzorku nápoje N2 - pokračování

	Benzylalkohol	6,3 ± 1,7
	Cinnamal	17 ± 5
	Eugenol	4,20 ± 1,13
	Isoeugenol 1	26 ± 4
	Isoeugenol 2	7,35 ± 1,26
	Amylcinnamal	4,3 ± 0,7
	Anisalkohol	1,9 ± 0,4
	Cinnamylalkohol	1,7 ± 0,5
	Farnesol 1	2,3 ± 0,3
	Farnesol 2	2,1 ± 0,4
	Farnesol 3	1,63 ± 0,19
	Hexylcinnamal	3,04 ± 0,07
	Benzylbenzoát	12,6 ± 1,8

Tabulka 88 Vonné alergenů identifikované ve vzorku nápoje N3

Nápoj N3		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [µg.ml⁻¹]
Přírodní višňová šťáva z koncentrátu, přírodní aromatický přípravek, aroma	Linalool	2269 ± 11 *
	Methyl 2-oktynoát	1,09 ± 0,15
	α-Isomethyl ionon	3,7 ± 0,3
	Benzylalkohol	10,4 ± 2,3
	Cinnamal	6,50 ± 0,04
	Eugenol	12,1 ± 0,7
	Amylcinnamal	3,4 ± 0,5
	Anisalkohol	0,84 ± 0,09
	Cinnamylalkohol	0,83 ± 0,14
	Benzylbenzoát	4,84 ± 0,4

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 89 Vonné alergenů identifikované ve vzorku nápoje N4

Nápoj N4		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [µg.ml⁻¹]
Aroma	Linalool	14,42 ± 0,22
	Citral 1	21,06 ± 2,13
	Citral 2	27 ± 4
	Citronellol	0,53 ± 0,03 **
	α-Isomethyl ionon	2,9 ± 0,7
	Benzylalkohol	0,86 ± 0,04
	Cinnamal	0,57 ± 0,13
	Amylcinnamal	3,3 ± 0,8
Anisalkohol	0,41 ± 0,08 **	

Tabulka 89 Vonné alergený identifikované ve vzorku nápoje N4 - pokračování

	Cinnamylalkohol	0,43 ± 0,09 **
	Hexylcinnamal	1,46 ± 0,13
	Benzylbenzoát	4,5 ± 0,6

** < LOQ

Tabulka 90 Vonné alergený identifikované ve vzorku nápoje N5

Nápoj N5		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergený	c [µg.ml ⁻¹]
Aroma	Limonen	1148 ± 21
	Linalool	11,4 ± 1,3
	Methyl 2-oktynoát	1,06 ± 0,09
	Citronellol	0,82 ± 0,07 **
	Geraniol	14,9 ± 1,4
	α-Isomethyl ionon	2,9 ± 0,6
	Benzylalkohol	2,53 ± 0,15
	Lilial	4,87 ± 0,03
	Isoeugenol 1	9,5 ± 0,7
	Isoeugenol 2	1,64 ± 0,04
	Amylcinnamal	5,9 ± 0,8
	Anisalkohol	0,87 ± 0,03
	Cinnamylalkohol	0,59 ± 0,13
	Hexylcinnamal	1,9 ± 0,5
	Benzylbenzoát	7,8 ± 1,4

** < LOQ

Tabulka 91 Vonné alergený identifikované ve vzorku nápoje N6

Nápoj N6		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergený	c [µg.ml ⁻¹]
Jablečné a citrónové přírodní aroma	Limonen	479 ± 62
	Amylcinnamylalkohol	54 ± 8
	Linalool	18 ± 4
	Methyl 2-oktynoát	1,06 ± 0,07
	Citronellol	2,54 ± 0,24
	Geraniol	8,7 ± 0,4
	α-Isomethyl ionon	3,4 ± 0,9
	Benzylalkohol	3,70 ± 0,23
	Lilial	5,8 ± 0,5
	Isoeugenol 1	14,4 ± 0,7
	Isoeugenol 2	2,5 ± 0,3
	Amylcinnamal	6,30 ± 0,05
	Anisalkohol	2,1 ± 0,7

Tabulka 91 Vonné alergeny identifikované ve vzorku nápoje N6 - pokračování

	Cinnamylalkohol	0,88 ± 0,24
	Hexylcinnamal	2,0 ± 0,4
	Benzylbenzoát	6,6 ± 0,5

Tabulka 92 Vonné alergeny identifikované ve vzorku nápoje N7

Nápoj N7		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Jablečná šťáva (21% hm.) z jablečného koncentrátu, broskvová šťáva (3,3% hm.) z broskvového koncentrátu, aroma	Limonen	67,0 ± 2,3
	Amylcinnamylalkohol	52 ± 4
	Linalool	4,9 ± 0,3
	Methyl 2-oktynoát	1,65 ± 0,24
	Citral 1	2,7 ± 0,6
	Citral 2	141 ± 13
	Citronellol	1,91 ± 0,16
	Benzylalkohol	16,30 ± 0,13
	Cinnamal	4,4 ± 1,4
	Eugenol	8,3 ± 1,6
	Amylcinnamal	9,8 ± 1,8
	Hexylcinnamal	6,3 ± 0,6
	Benzylbenzoát	11,5 ± 1,8

Tabulka 93 Vonné alergeny identifikované ve vzorku nápoje N8

Nápoj N8		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Koncentrát z jahodové šťávy (12 %), aroma (přírodní), šťáva z černého rybízu	Limonen	2,70 ± 0,05
	Amylcinnamylalkohol	15 ± 2
	Linalool	8,39 ± 0,24
	Methyl 2-oktynoát	1,9 ± 0,4
	Citral 1	2,3 ± 0,4
	Citral 2	6,4 ± 1,6
	Citronellol	2,1 ± 0,3
	Geraniol	4,3 ± 0,4
	Benzylalkohol	2,5 ± 0,5
	Cinnamal	1,39 ± 0,13
	Eugenol	5,3 ± 0,7
	Amylcinnamal	4,1 ± 0,9
	Hexylcinnamal	3,6 ± 0,4
Benzylbenzoát	4,7 ± 0,4	

Tabulka 94 Vonné alergeny identifikované ve vzorku nápoje N9

Nápoj N9		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Aroma	Limonen	7,19 ± 0,28
	Amylcinnamylalkohol	4,6 ± 1,7
	Linalool	9,2 ± 0,8
	Methyl 2-oktynoát	0,87 ± 0,03
	Geraniol	6,6 ± 0,9
	α -Isomethyl ionon	47,7 ± 0,5
	Benzylalkohol	0,98 ± 0,15
	Cinnamal	3,7 ± 0,6
	Isoeugenol 1	4,3 ± 1,3
	Isoeugenol 2	0,46 ± 0,07 **
	Amylcinnamal	3,5 ± 0,7
	Anisalkohol	0,81 ± 0,23
	Cinnamylalkohol	1,5 ± 0,4
	Farnesol 1	0,54 ± 0,13 **
	Farnesol 2	0,64 ± 0,13 **
	Farnesol 3	1,2 ± 0,3
	Hexylcinnamal	1,90 ± 0,8
Benzylbenzoát	5,9 ± 0,9	

** < LOQ

Tabulka 95 Vonné alergeny identifikované ve vzorku nápoje N10

Nápoj N10		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergeny	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Pomerančová šťáva (1,7% z pomerančového koncentrátu), aroma	Limonen	5475 ± 36 *
	Amylcinnamylalkohol	57 ± 3
	Linalool	9,2 ± 0,6
	Methyl 2-oktynoát	9,5 ± 0,7
	Citral 1	26,5 ± 1,8
	Citral 2	26,5 ± 0,4
	Citronellol	1,7 ± 0,3
	α -Isomethyl ionon	19,4 ± 3,4
	Benzylalkohol	2,74 ± 0,16
	Cinnamal	1,7 ± 0,6
	Eugenol	16 ± 5
	Amylcinnamal	3,4 ± 0,4
	Anisalkohol	0,54 ± 0,06
	Cinnamylalkohol	0,9 ± 0,3
	Hexylcinnamal	3,60 ± 0,24
Benzylbenzoát	7,7 ± 0,8	

* mimo stanovený lineární rozsah

Tabulka 96 Vonné alergenů identifikované ve vzorku nápoje N11

Nápoj N11		
Údaje uvedené na etiketě	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$]
Aroma	Limonen	2019 ± 241 *
	Amylcinnamylalkohol	51 ± 6
	Linalool	7,16 ± 0,23
	Methyl 2-oktynoát	6,2 ± 1,7
	Citral 1	15,92 ± 1,5
	Citral 2	3,2 ± 0,7
	Geraniol	31 ± 3
	Benzylalkohol	6,5 ± 1,3
	Cinnamal	2,4 ± 0,6
	Amylcinnamal	3,6 ± 0,3
	Anisalkohol	0,54 ± 0,09
	Cinnamylalkohol	0,89 ± 0,09
	Hexylcinnamal	3,4 ± 0,7
	Coumarin	13,9 ± 0,7
Benzylbenzoát	6,56 ± 0,24	

* mimo stanovený lineární rozsah

5.5.3 Dětské hračky

Byly analyzovány tři vzorky dětských hraček, na obalech byl uveden pouze termín „scented“, „fragrance/parfum“ a/nebo „parfum“. Podle vyhlášky č. 86/2011 Sb. (kap. 2.4.1) názvy jednotlivých vonných látek obsažených v hračce nebo jejích součástech musí být uvedeny na obale produktu tehdy, pokud jsou přítomny v koncentracích vyšších než $100 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$. Dětská hračka H1 původem z Číny byla určena dětem od 3 let. Vzorek H2 představoval kosmetickou hračku původem z Číny a byl doporučen pro děti od 6-ti let. Tento vzorek také splnil podmínku zmíněné vyhlášky č. 86/2011 Sb. Vzorek dětské hračky H3 představoval třpytivý lesk na rty, který byl určen pro děti od 5-ti let. Všechny tři testované vzorky hraček byly v souladu s uvedenou vyhláškou č. 86/2011 Sb. Zastoupení vonných alergenů a jejich koncentrace ve vzorcích H1-H3 jsou uvedeny v **Tabulkách 97-99**.

Tabulka 97 Vonné alergenů identifikované ve vzorku dětské hračky H1

Hračka H1		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [$\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$]
Scented	Limonen	2,43 ± 0,25
	Amylcinnamylalkohol	3,84 ± 0,13
	Linalool	2,13 ± 0,03
	Methyl 2-oktynoát	0,81 ± 0,03
	Citral 1	13,4 ± 0,7

Tabulka 97 Vonné alergenů identifikované ve vzorku dětské hračky H1 - pokračování

	Citronellol	4,85 ± 0,03
	Geraniol	4,12 ± 0,04
	α-Isomethyl ionon	78 ± 4
	Cinnamal	1,72 ± 0,04
	Cinnamylalkohol	3,24 ± 0,03
	Benzylbenzoát	29,2 ± 2,3
	Lyrál 1	neidentifikováno
	Lyrál 2	37,4 ± 2,6

Tabulka 98 Vonné alergenů identifikované ve vzorku dětské hračky H2

Hračka H2		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [μg.g⁻¹]
Fragrance/Parfum	Limonen	4,09 ± 0,06
	Linalool	19,8 ± 0,8
	Citral 1	9,53 ± 0,14
	Citral 2	5,84 ± 0,15
	Citronellol	6,29 ± 0,17
	Geraniol	4,39 ± 0,07
	Benzylalkohol	0,380 ± 0,004
	Eugenol	5,24 ± 0,13
	Benzylbenzoát	5,75 ± 0,24

Tabulka 99 Vonné alergenů identifikované ve vzorku dětské hračky H3

Hračka H3		
Vonné alergenů uvedené na obalu	Identifikované vonné alergenů	c [μg.g⁻¹]
Parfum	Limonen	8,10 ± 0,24
	Linalool	9,58 ± 0,27
	Methyl 2-oktynoát	5,93 ± 0,08
	Citronellol	9,35 ± 0,27
	Geraniol	4,22 ± 0,25
	α-Isomethyl ionon	3,59 ± 0,03
	Lilial	33,7 ± 1,3
	Eugenol	1,86 ± 0,04
	Amylcinnamal	7,36 ± 0,23
	Benzylbenzoát	3,81 ± 0,08

5.6 Senzorické hodnocení reálných vzorků

Senzorické hodnocení bylo aplikováno na totožné vzorky, které byly podrobeny instrumentální analýze pro stanovení alergenních vonných látek. Předmětem hodnocení byly kosmetické prostředky (přípravky určené k péči o pleť, k péči o tělo, k ústní hygieně, dětská kosmetika) a potraviny (sypané čajové směsi, čajové směsi porcované, želatinové bonbóny, žvýkáci gummy, alkoholické a nealkoholické nápoje). Pro sensorické hodnocení výše zmíněných vzorků byl použit profilový test a hodnocení podle sedmibodové kategorové ordinální stupnice. Hodnotitelé hodnotili příjemnost, intenzitu a charakteristiku chuti a vůně vzorků.

Pro sensorické hodnocení sypaných čajových směsí byl použit poněkud odlišný hodnotitelský formulář (Příloha F), než pro ostatní vzorky. Kategorie chuť a vůně byly hodnoceny společně a pouze z hlediska hedonického, navíc byla hodnocena celková sensorická kvalita (přijatelnost) vzorku. Intenzita byla hodnocena pouze u vybraných deskriptorů.

Vzorky sypaných čajů byly hodnoceny jako první a po zhodnocení výsledků se ukázalo, že bude vhodné chuť i vůni vzorků hodnotit odděleně, kromě toho bylo do dalších formulářů zahrnuto i hodnocení chuti a vůně z hlediska intenzity. Naopak hodnocení celkové sensorické kvality se ukázalo být pro naše účely méně důležité, hodnotitelé se zbytečně rozptylují a nemohou se soustředit na důkladné sledování chuti a vůně. Podle těchto poznatků byly upraveny dotazníky pro hodnocení dalších typů vzorků.

V první části dotazníku byla hodnocena intenzita a příjemnost celkové vůně, v případě potravin a zubních past také chuť na základě sedmibodových intenzitních (1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná) a/nebo hédonických stupnic (1 neobyčejně příjemná \Rightarrow 7 nepříjemná).

Pomocí profilového testu byla hodnocena intenzita vybraných deskriptorů chuti a vůně, na závěr bylo hodnoceno i tzv. časové dozrívání chuti a vůně vzorků (intenzita daného vjemu v určitých časových intervalech). Vedle konkrétních deskriptorů (ovocná, kyselá, sladká, apod.), byly do dotazníku zahrnuty i tři obecné deskriptory:

- *charakteristická* - hodnotitelé se měli pokusit popsat vůni a/nebo chuť, která jim připadá pro daný vzorek typická, charakteristická, nejsilněji vnímaná
- *jiná příjemná* - jakákoliv jiná vnímaná vůně a /nebo chuť, v dostatečné intenzitě, kterou lze popsat jako příjemnou
- *jiná nepříjemná* - vůně a /nebo chuť pro vzorek netypická, nepříjemná, v dostatečné intenzitě (*off-flavour*)

V tabulkách doplňujících výsledky profilových testů jsou vždy přehledně uvedeny termíny, které jednotliví hodnotitelé uvedli pro charakterizaci těchto obecných deskriptorů.

Použitá stupnice pro profilové testy: 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná

Senzorická hodnocení byla provedena za účelem charakterizace a kvantifikace sensorických atributů spojených s flavourem, aby se vytvořila komplexnější představa o tom, co je prezentováno jako „typický“ nebo „charakteristický“ flavour daného typu výrobku. Z výsledků lze usuzovat, zda je intenzita flavouru dostatečně silná, aby jej hodnotitelé vnímali a zda je natolik charakteristický, že je většina hodnotitelů schopna jej rozpoznat a popsat.

Hodnocení bylo vždy rozděleno do několika dnů z důvodu velkého počtu vzorků. Hodnotitelům bylo předkládáno maximálně 10 vzorků denně, aby nedocházelo k jejich únavě.

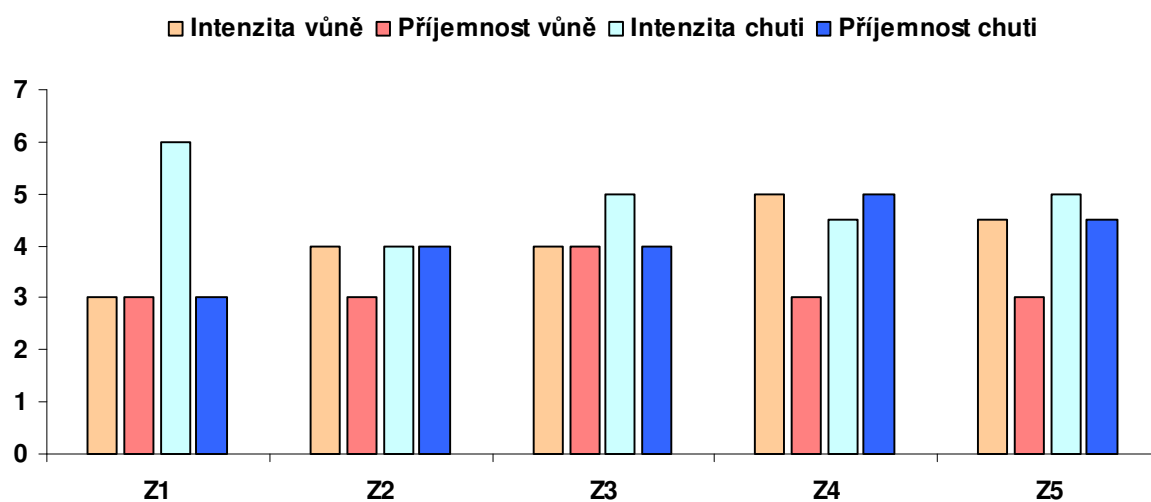
5.6.1 Kosmetické přípravky

5.6.1.1 Zubní pasty

Celkem bylo hodnoceno pět zubních past určených pro děti s jahodovou, ovocnou a mátovo-ovocnou příchutí. Cílem sensorického hodnocení bylo vyhodnotit vůni jednotlivých vzorků, a protože zubní pasta se aplikuje v ústech, bylo provedeno i obdobné hodnocení chuti. Hodnotitelé byli upozorněni, že vzorky nemusejí polykat. Pozornost byla zvláště zaměřena na to, zda jsou příchutě dostatečně intenzivní, chutnají příjemně a zda budou hodnotitelé schopni jednotlivé příchutě poznat a popsat. Dotazník použitý pro hodnocení zubních past byl obdobný jako pro hodnocení potravin (Příloha D).

Výsledky hodnocení podle stupnice

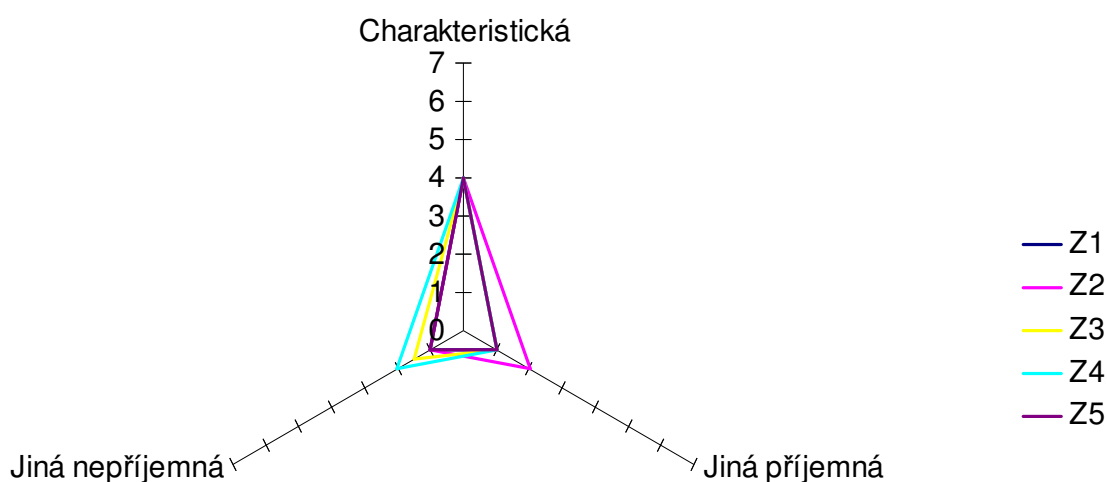
Nejprve byla hodnocena intenzita (1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná) a příjemnost (1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelný) celkové vůně a chuti zubních past. Výsledky jsou uvedeny v grafu na **Obrázku 13**. Mezi vzorky nebyly nalezeny statisticky významné ($P \geq 0,05$) rozdíly v intenzitě ani příjemnosti chuti i vůně. Nicméně z grafického vyjádření je patrné, že malé rozdíly mezi vzorky existují. Dětské zubní pasty mají většinou výraznou chuť a vůni syntetického původu, intenzita vůně všech vzorků byla označena jako slabá až střední, intenzita chuti jako střední až silnější. Příjemnost chuti i vůně byla většinou hodnocena stupněm velmi dobrý. Vzorek Z1 vykazoval nejvyšší intenzitu chuti (dosti silná), jedná se o vzorek s mátovo ovocnou příchutí, tento vzorek zároveň hodnotitelům nejpříjemněji chutnal.



Obr. 13 Srovnání intenzity a příjemnosti vůně a chuti vzorků zubních past. Použitá stupnice pro intenzitu vůně a chuti: 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná. Použitá stupnice pro příjemnost vůně a chuti: 1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelná. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 3.

Výsledky profilového testu

Pro podrobnější popis vůně a chuti vzorků byla hodnocena intenzita vybraných deskriptorů pomocí profilového testu: 3 deskriptory vůně (charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná) a 6 deskriptorů chuti (charakteristická, ovocná, sladká, kyselá, jiná příjemná a jiná nepříjemná) pomocí uvedené intenzitní stupnice. K celkovému profilu vůně nejvíc přispívala vůně charakteristická, intenzita jiné příjemné a nepříjemné vůně byla většinou hodnocena jako velmi slabá až nezatelná (**Obrázek 14**). Charakteristickou a jinou příjemnou vůni hodnotitelé popisovali různorodě, jinou nepříjemnou vůni hodnotitelé neuváděli. Seznam výrazů pro deskriptory charakteristická a jiná příjemná je uveden v **Tabulce 100**.



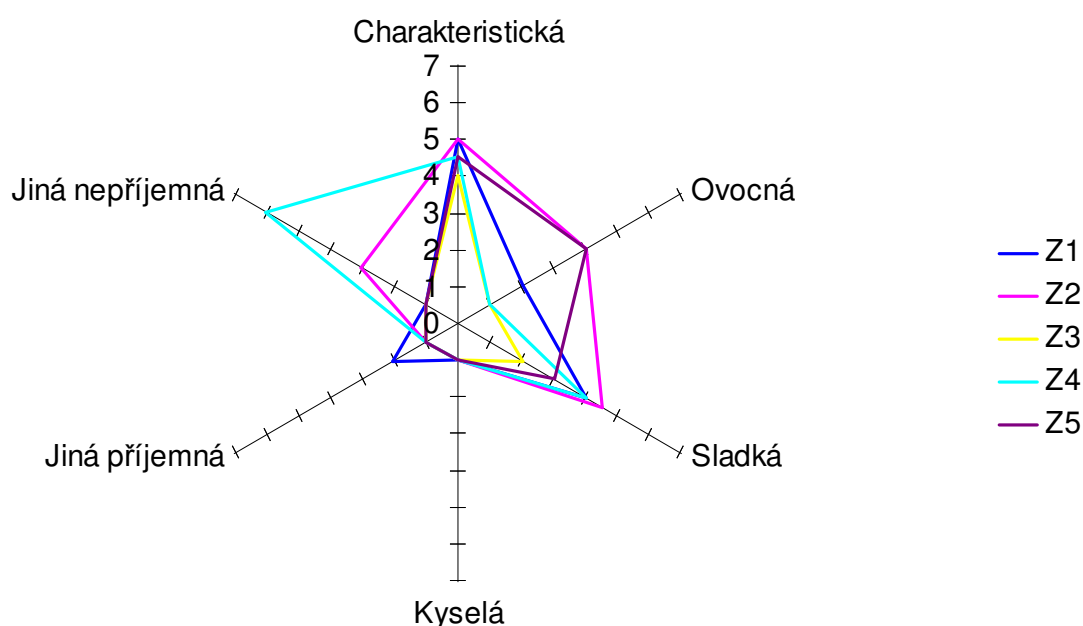
Obr. 14 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky zubních past Z1-Z5. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 3.

Tabulka 100 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická a jiná příjemná vůně“, tj. vůně, která podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 3.

Profilový test vůní		Z1	Z2	Z3	Z4	Z5
Charakteristická	mentol	1		4		
	tutti frutti	2			4	1
	jahoda		5			5
	lékořice	1				
	meloun				1	1
	lesní plody		1			
	malina		1			
Jiná, příjemná	ovoce		2			
	bonbóny				1	
	hřebíček	1				
	bylinky	1				

Chuť byla navíc charakterizována pomocí tří deskriptorů – ovocná, sladká a kyselá. Profil chuti jednotlivých vzorků zubních past se také významně ($P < 0,05$) odlišoval. Jak je vidět na **Obrázku 15**, nejvíce ve všech vzorcích převládala sladká a ovocná chuť, kyselá chuť byla téměř nevnímání. Nejvíce ovocné se hodnotitelům jevily vzorky Z2 a Z5, oba jsou podle informací na obalu s jahodovou příchutí, nejvíce sladký byl vzorek Z2. Jiná příjemná i nepříjemná chuť byla většinou vnímána jako velmi slabá. Pouze u vzorku Z4 hodnotitelé uváděli dosti silnou intenzitu nepříjemné chuti, kterou popisovali jako štiplavou, škrobovou, příliš aromatickou (**Tabulka 101**).

Hodnotitelé kromě intenzity určovali také charakter vnímané chuti. Vzhledem k tomu, že skoro všechny vzorky zubních past byly s ovocnou příchutí, nejvíce byla jako charakteristická uváděna chuť jahodová či jiná ovocná (**Tabulka 101**). Jiná příjemná a nepříjemná chuť vzorků byla hodnotiteli charakterizována různě, nicméně vzhledem k velmi nízké intenzitě pravděpodobně k celkovému flavouru vzorků výrazně nepřispívá.



Obr. 15 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chutí pro vzorky zubních past Z1-Z5. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 3.

Tabulka 101 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná“ chuť, tj. chuť, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 3.

Profilový test chutí		Z1	Z2	Z3	Z4	Z5
Charakteristická	mentol	2		1	1	
	tutti frutti	1		1	2	
	jahoda	1	3	3	1	5
	třešeň		1			
	malina		1			

Tabulka 101 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná“ chuť, tj. chuť, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 3 - pokračování

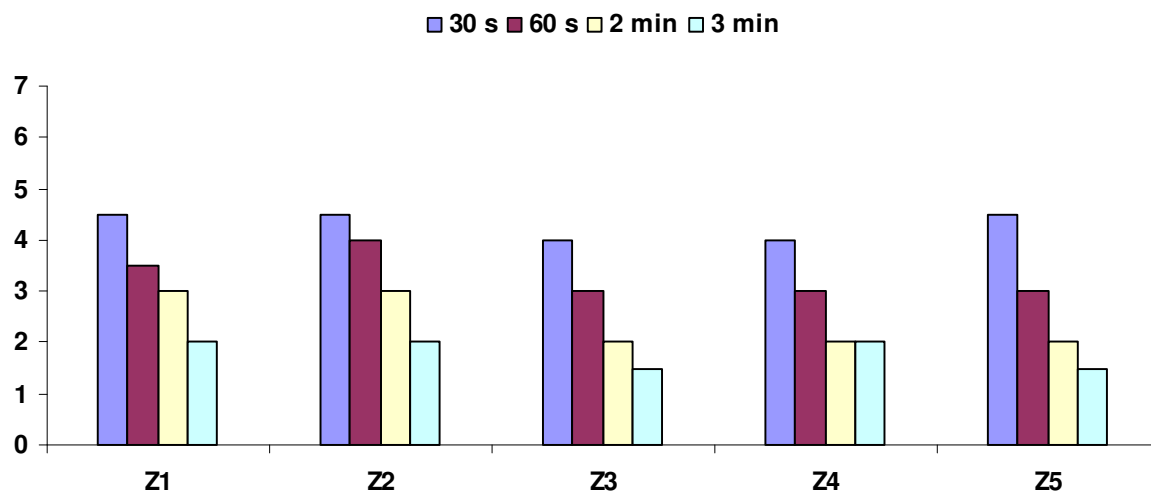
Jiná, příjemná	mentol	3	1	1	1	1
	tutti frutti		1		1	
	jahoda		2			
	bonbon	1				
Jiná, nepříjemná	nahořklá		1	1		
	štíplavá				2	
	pálivá		1	1		1
	příliš aromatická				1	
	škrob		1		1	1

Časové doznívání chuti

U vzorků zubních past bylo na závěr hodnoceno také časové doznívání chuti. Hodnotitelé hodnotili intenzitu příjemné charakteristické a také příp. nepříjemné chuti v určených časových intervalech po dobu 3 minut. Po uplynutí stanovené doby měli navíc popsat konečný vjem chuti (příp. jiné pocity v ústech).

Jak je patrné z **Obrázku 16**, intenzita vnímání příjemné chuti se postupně snižovala. Po třech minutách byla intenzita chuti velmi slabá, a tudíž hodnotitelé nebyli schopni identifikovat konečný vjem chuti.

Intenzita nepříjemné chuti byla po vymezenou dobu u všech vzorků hodnocena jako velmi nízká (neznatelná). Jiná (tzv. následná) chuť po 3 minutách nebyla hodnotiteli identifikována u žádného vzorku ve vnímatelné intenzitě.



Obr. 16 Časové doznívání intenzity charakteristické (příjemné) chuti vzorků zubních past. Kódy vzorků viz Tabulka 3.

5.6.1.2 Kosmetické přípravky

V této skupině bylo podrobena sensorickému hodnocení široké spektrum různých kosmetických přípravků zahrnující pleťové vody, pleťové krémy, pleťovou masku, krémy na ruce, tělové máslo a tělové mléko, vody po holení, sprchové gely, šampón, antiperspirant a deodorant, balzám na rty a dětskou kosmetiku (dětské oleje, masti a krémy).

Vzorky byly vybrány tak, aby pokryly různé typy kosmetických výrobků používaných běžně v průběhu celého dne. Byly zvláště zvoleny výrobky, u nichž lze předpokládat (podle značení na obalu), že byly parfémovány, a nebo naopak výrobky, které by podle předpokladu parfémovány být neměly (např. dětská kosmetika nebo výrobky označené „bez vonných látek, které mohou vyvolat alergickou reakci“).

Přestože u těchto výrobků hraje vůně v podstatě doplňkovou roli a hlavní účel jejich použití je jiný (čisticí apod.), většinou je to právě vůně, co spotřebitelé nejvíce zajímá a často si především podle vůně tyto produkty vybírají. Sensorické hodnocení bylo tedy zaměřeno na vůni jednotlivých vzorků. Při hodnocení byly vzorky postupně aplikovány na pokožku (na hřbet ruky popř. na předloktí) a následně hodnoceny. Pozornost byla zvláště zaměřena na to, zda je vůně příjemná, přiměřeně intenzivní a po nanesení na pokožku delší dobu přetrvává.

Výsledky hodnocení podle stupnice

Nejprve byla hodnocena intenzita (1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná) a příjemnost (1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelný) celkové vůně jednotlivých vzorků. Výsledky jsou uvedeny v grafu na **Obrázku 17**.

Pleťové vody (K1-K4), pleťové krémy (K5-K7) a pleťové masky (K10) jsou určeny k aplikaci na obličej. Vzhledem k tomu, že pokožka je zde velmi jemná, měla by být parfemace minimální a nepřetrvávat [174].

Mezi těmito vzorky byly nalezeny významné ($P < 0,05$) rozdíly v intenzitě i příjemnosti vůně. Intenzita vůně pleťových vod byla obecně vyšší než pleťových krémů. Nejvyšší intenzitu vůně (dosti silná) vykazovaly vzorky pleťových vod K1 a K3, intenzita vůně pleťových krémů a masky byla hodnocena jako dosti slabá nebo slabá. Nejpříjemněji voněl vzorek pleťové vody K1 a naopak nejhůře vzorek K3 (méně příjemná), také vůně pleťové masky byla označena jako méně příjemná. Příjemnost vůně všech pleťových krémů byla hodnocena jako neutrální.

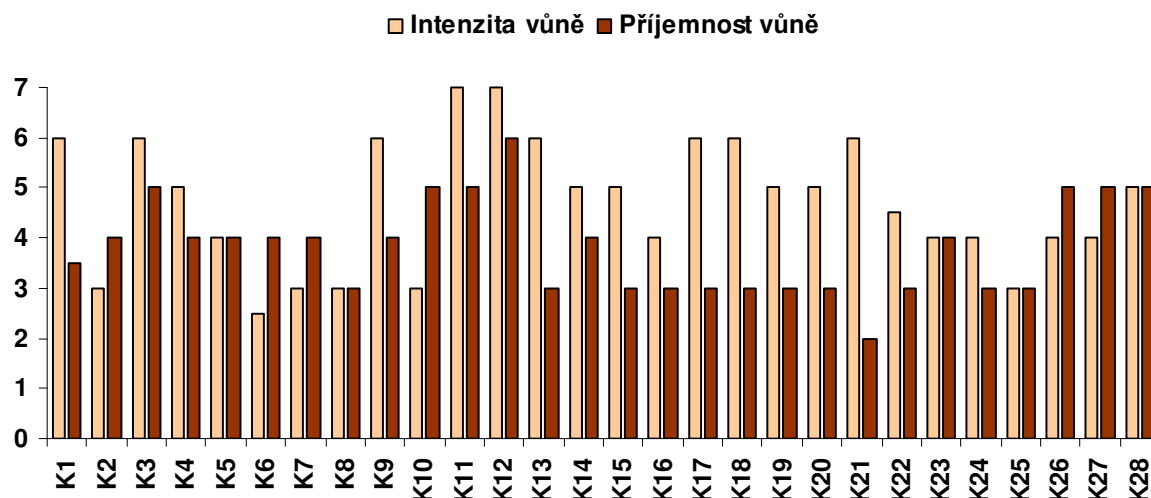
Lze říci, že výsledky hodnocení intenzity vůně odpovídají požadavku mírné parfemace, pouze u dvou vzorků (K1 a K3) byla vůně hodnocena jako dosti silná. Zajímavé je poměrně nízké hodnocení příjemnosti vůně, nejlepší vzorek (pleťová voda K1) byl hodnocen pouze jako příjemný.

Vzorek dětského pleťového krému (K8) měl na obalu deklarováno „...jemná parfemace..“. Jeho vůně byla hodnocena jako příjemná, a v souladu s uvedeným tvrzením slabé intenzity.

Vzorek balzámu na rty (K9) vykazoval ovocnou vůni dosti silné intenzity, její příjemnost však byla hodnocena pouze jako neutrální.

Oba vzorky vody po holení (K11 a K12) se vyznačovaly velmi výraznou vůní, kterou hodnotitelé označili jako velmi silnou, ale překvapivě méně příjemnou (K11) až nepříjemnou (K12). Jak již bylo zmíněno dříve, příliš vysoká parfemace těchto produktů není vhodná, poněvadž jsou nanášeny na čerstvě oholenou pokožku a může tak snadno dojít k jejímu podráždění.

Tělové máslo (K13) a tělové mléko (K14) jsou přípravky určené k péči o pokožku celého těla. Lépe byl hodnocen vzorek tělového másla K13 ($P < 0,05$), jehož vůně byla označena jako příjemná a dosti silná. Vůně tělového mléka pouze jako silnější a z hlediska příjemnosti neutrální.



Obr. 17 Srovnání intenzity a příjemnosti vůně vzorků kosmetických přípravků. Použitá stupnice pro intenzitu vůně: 1 nezatelná \Rightarrow 7 velmi silná.. Použitá stupnice pro příjemnost vůně: 1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelná. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 4, 5.

Také sprchové gely (K15-18) a šampón (K19) patří mezi přípravky určené k péči o tělo. Mezi těmito vzorky byly nalezeny statisticky významné ($P < 0,05$) rozdíly v intenzitě vůně. Nejintenzivnější vůni vykazovaly vzorky K17 (pánský sprchový gel s kořeněnou vůní) a K18 (sprchový gel s vůní citrónové trávy), jejich vůně byla hodnocena jako dosti silná, naopak gel K16 voněl nejméně intenzivně. Příjemnost vůně byla hodnocena u všech vzorků obdobně (jako příjemná).

Deodoranty a antiperspiranty se aplikují v podpaží, kde je velmi citlivá pokožka náchylná k zarudnutí a podráždění obzvláště po oholení [174]. Mezi vzorky antiperspirantu pro ženy (K20) a deodorantu pro muže (K21) byly nalezeny významné ($P < 0,05$) rozdíly v intenzitě i příjemnosti vůně. Překvapivě lépe byl hodnocen vzorek pro muže (K21), který měl kořeněnou vůni, hodnotiteli popsanou jako dosti silná a velmi příjemná. Vůně antiperspirantu pro ženy (K20) byla hodnocena pouze jako silnější, příjemná.

Vzorky krémů na ruce měly středně intenzivní vůni, příjemnou (K22) nebo neutrální (K23).

Vzorky dětské kosmetiky zahrnují oleje (K24 a K25), tělové mléko (K26), krém (K27) a mast (K28). Vzhledem k tomu, že se jedná o výrobky určené pro děti, měly by vyhovovat požadavku minimální parfemace případně zcela bez parfemace, neboť vonné látky mohou obzvláště u dětí vyvolávat různé nežádoucí účinky typu alergií [172].

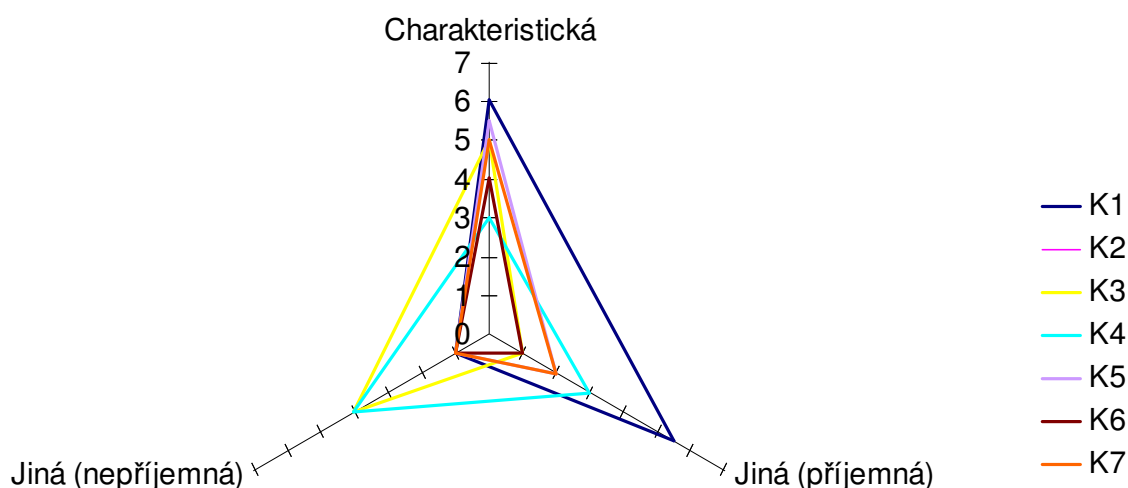
Mezi těmito vzorky byly nalezeny významné ($P < 0,05$) rozdíly v intenzitě i příjemnosti vůně. Vůně dětských olejů (K24 a K25) byla hodnocena jako slabá, ale příjemná. Ostatních vzorků jako střední nebo silnější, ale méně příjemná. Hodnocení příjemnosti je poměrně

překvapivé, vzhledem k tomu, že např. u vzorku tělového mléka (K26) bylo deklarováno „uklidňující aroma z levandule, růžového dřeva a jasmínu“

Výsledky profilového testu

Pro podrobnější popis vůně vzorků byla hodnocena intenzita vybraných deskriptorů (charakteristická, jiná-příjemná a jiná-nepříjemná vůně) pomocí profilového testu s použitím uvedené intenzitní stupnice. Profily vůně jednotlivých kosmetických výrobků se poměrně výrazně ($P < 0,05$) odlišovaly.

Jak je patrné z grafu na **Obrázku 18** u vzorků pleťových vod a krémů (K1-K7) dominovala vůně charakteristická, která dosahovala silnější až dosti silné intenzity. Hodnotitelé ji většinou popisovali obecně jako květiny, ovoce nebo byliny (**Tabulka 102**). Pouze u vzorku K5 (přírodní olivový krém) hodnotitelé správně rozpoznali olivy. U vzorků pleťových vod K3 a K4 byla detekována nepříjemná vůně střední intenzity, kterou ale hodnotitelé nebyli schopni popsat.

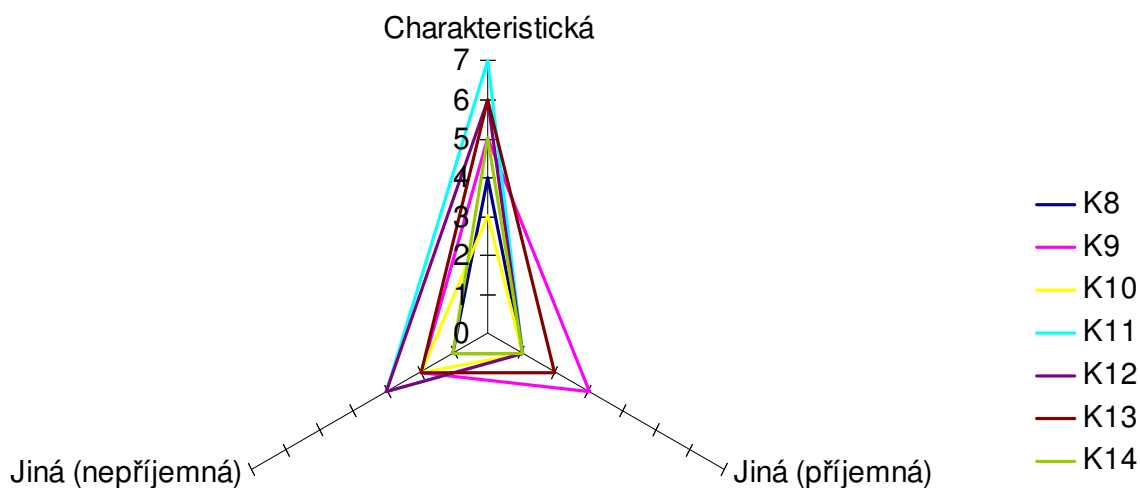


Obr. 18 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky kosmetických přípravků K1-K7. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz **Tabulka 4**.

U balzámu na rty (K9) hodnotitelé vnímali charakteristickou vůni silnější intenzity, jinou příjemnou vůni hodnotili jako slabou (**Obrázek 19**). Hodnotitelé správně specifikovali vůni, kterou popisovali jako ovocnou.

Oba vzorky vod po holení (K11 a K12) se vyznačovaly velmi výraznou vůní, dominovala vůně charakteristická v dosti až velmi silné intenzitě (**Obrázek 19**), kterou hodnotitelé popisovali jako po alkoholu, bylinná, kořeněná, dřevitá (**Tabulka 102**). Zároveň u nich vnímali slabou nepříjemnou vůni, kterou ale nebyli schopni charakterizovat.

U vzorků tělového másla (K13) a mléka (K14) dominovala silnější až dosti silná charakteristická vůně (**Obrázek 19**), popisovaná jako květinová, ovocná a/nebo citrusová (**Tabulka 102**).

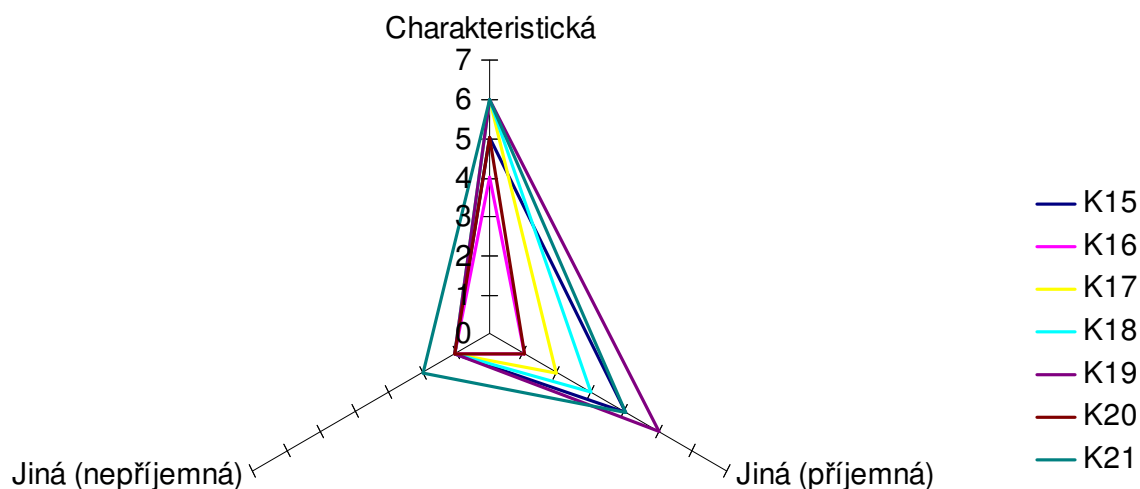


Obr. 19 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky kosmetických přípravků K8-K14. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 4, 5.

U vzorků sprchových gelů (K15-18) hodnotitelé vnímali především charakteristickou vůni (**Obrázek 20**) v silnější až dosti silné intenzitě, kterou popisovali jako květinovou (K15 a K16). U vzorku K17 správně rozpoznali kořeněnou a u vzorku K18 citrusovou vůni (**Tabulka 103**).

Vzorek šampónu (K19) měl výraznou příjemnou vůni popisovanou jako bylinná, po trávě (**Tabulka 103**).

Antiperspirant pro ženy (K20) se vyznačoval dosti silnou citrusovou, deodorant pro muže (K21) kořeněnou vůní, někteří hodnotitelé také uváděli mentol (**Tabulka 103**).



Obr. 20 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky kosmetických přípravků K15-K21. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 5.

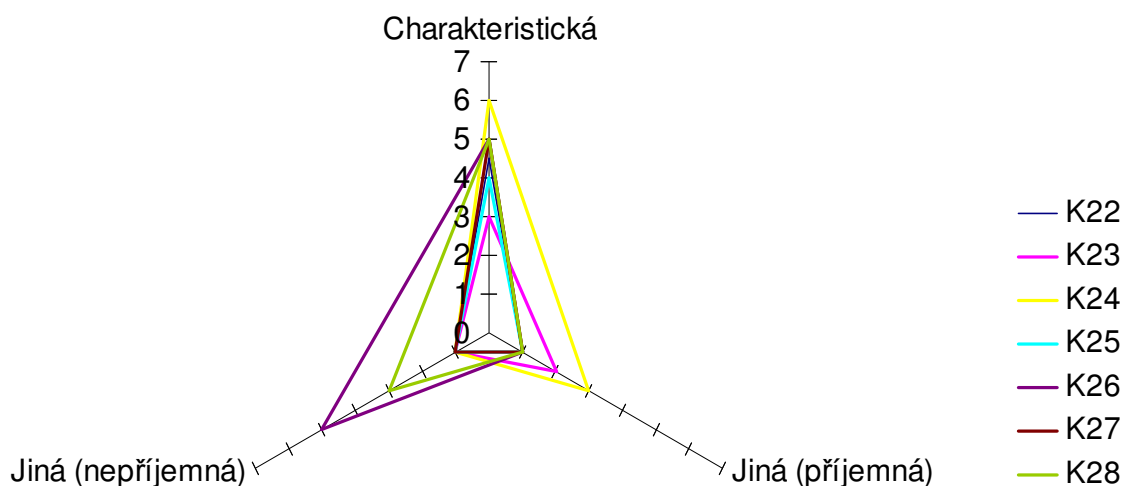
Charakteristická vůně krémů na ruce (K22 a K23) byla slabá, označená jako květinová nebo bylinná (**Obrázek 21**) (**Tabulka 103**).

Také u vzorků dětské kosmetiky (K24-28) dominovala vůně charakteristická (**Obrázek 21**) (**Tabulka 103**). Dětský olej (K24) měl dosti silnou květinovou vůni.

U vzorku K26 (dětské tělové mléko s uklidňujícím aroma z levandule, růžového dřeva a jasmínu) hodnotitelé popisovali květinovou vůni silnější intenzity. Zároveň zde byla detekována nepříjemná vůně silnější intenzity, kterou ale hodnotitelé nebyli schopni popsat.

U dětského krému (K27) byla popisována bylinná vůně silnější intenzity.

Vzorek dětské masti (K28) měl charakteristickou vůni dosti silné intenzity a slabou blíže nepopsanou nepříjemnou vůni.



Obr. 21 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky kosmetických přípravků K22-K28. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 5.

Tabulka 102 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická a jiná příjemná“ vůně, tj. vůně, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 4, 5.

Profilový test vůní		K1	K2	K3	K4	K5	K6	K7	K8	K9	K10	K11	K12	K13	K14
Charakteristická	olivy					3									
	mandle			1					1						
	mentol														1
	květinová	1												2	
	meloun														
	bylinná					2							1		
	citrus	1					1				1				4
	panthenol		1		1										
	kořeněná											1	1		
	maliny/rybíz										1				
	měsíček								1	1					
	tráva	1							1						
	neutrální			1											
	alkohol			2									3		
ovoce										1				2	1
Jiná, příjemná	citrus	1	1												2
	ovocná														2
	bylinná		1			2	1					1			
	květinová	1	1						1				1		
	borovice					1						1	2		
	heřmánek	1													
	dřevitá											2			

Tabulka 103 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická a jiná příjemná“ vůně, tj. vůně, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 4, 5.

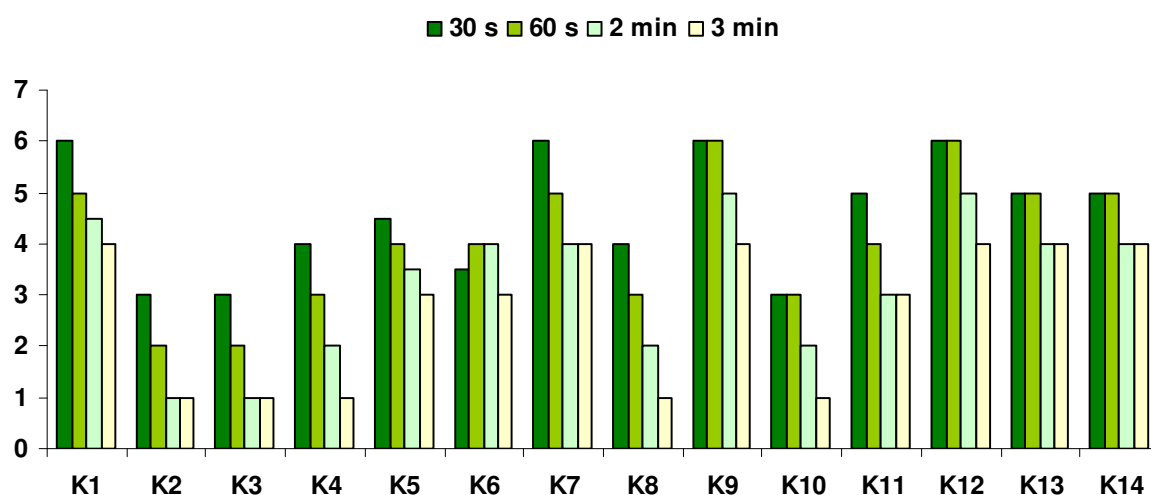
Profilový test vůní		K15	K16	K17	K18	K19	K20	K21	K22	K23	K24	K25	K26	K27	K28	
Charakteristická	olivy								1							
	mandle								1		1	1	1			
	mentol							2								
	květinová	2	3						1	2	3		1			
	meloun		1													
	bylinná		1			3								2		
	citrus			1	5		1									
	panthenol											1				
	kořeněná			3				4								1
	maliny/rybíz	1														
	měsíček					1										
	tráva					2										
	neutrální														2	1
	alkohol															
ovoce																
Jiná, příjemná	citrus	1					2								1	
	ovocná		1													
	bylinná								1							
	květinová	1			1				1			1				
	borovice															
	heřmánek								1							
	dřevitá	1														

Časové doznívání vůně

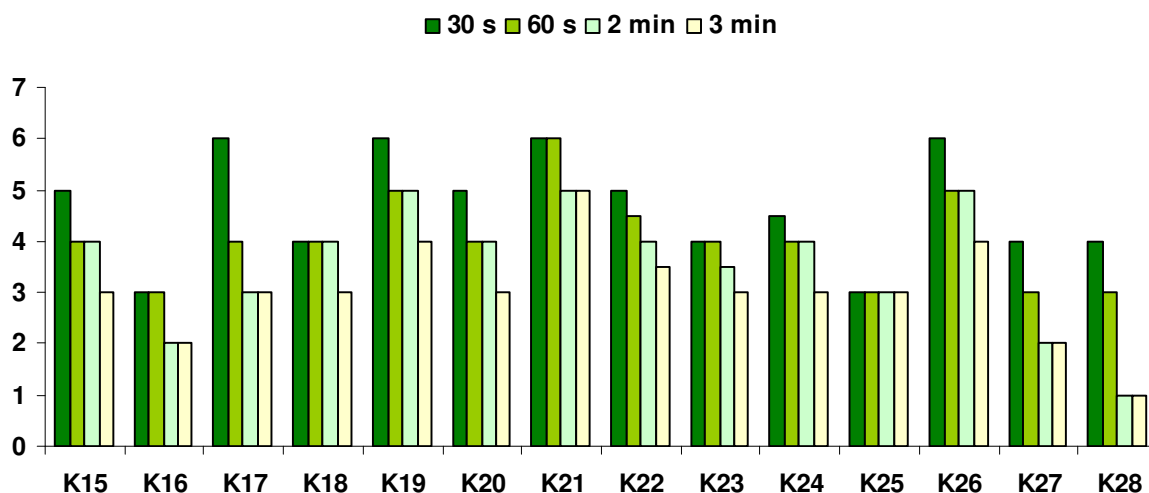
Pro získání komplexního popisu vůně vzorků bylo na závěr hodnoceno také časové doznívání vůně. Hodnotitelé si jednotlivé kosmetické přípravky natírali na ruku a hodnotili intenzitu příjemné charakteristické vůně v určených časových intervalech po dobu 3 minut. Po uplynutí 3 min. měli ještě popsat konečný vjem vůně (zda se změnil její charakter a zbytková intenzita).

Jak je patrné z grafů (**Obrázek 22 a 23**), podle očekávání se intenzita vůně postupně snižovala, u některých vzorků rychleji, u některých pomaleji. U většiny vzorků byla po 3 min. zbytková vůně velmi slabá nebo nezatelná.

U vzorků pleťové vody (K1), pleťového krému (K7), balzámu na rty (K9), vody po holení (K12), tělového másla a mléka (K13 a K14), šampónu (K19) a dětského tělového mléka (K26) vůně přetrvávala poměrně dlouhou dobu, i po 3 min. po aplikaci byla popsána jako střední intenzity, u vzorku deodorantu pro muže (K21) dokonce silnější intenzity.



Obr. 22 Časové doznívání intenzity charakteristické (příjemné) vůně vzorků kosmetických přípravků K1-K14. Kódy vzorků viz Tabulka 4, 5.



Obr. 23 Časové doznívání intenzity charakteristické (příjemné) vůně vzorků kosmetických přípravků K15-K28. Kódy vzorků viz Tabulka 4, 5.

5.6.2 Potraviny

Při sensorickém hodnocení potravin je důležitá nejen vůně, ale především chuť, které společně s hmatovými počítky v ústní dutině tvoří tzv. flavour potraviny [132, 133].

Chuť a/nebo vůně úzce souvisí s obsahem vonných látek, které byly sledovány v první části této práce (kapitola 5.5), při sensorickém hodnocení jsme se tedy zaměřili především na podrobné hodnocení chuti a vůně vzorků. Na rozdíl od kosmetických výrobků je chuť a vůně potraviny většinou přesně specifikována na obalu (jahodová, citronová, mátová apod.) nebo je patrná z typu, příp. složení výrobku. Významnou součástí sensorického hodnocení bylo pokusit se rozpoznat charakteristickou chuť a/nebo vůni výrobku. U potravin je také mnohem větší pravděpodobnost výskytu off-flavouru v důsledku nejrůznějších příčin, v případě hodnocených vzorků to může být např. použití levnějších surovin a/nebo syntetických přídavných látek.

5.6.2.1 Bylinné sypané čajové směsi

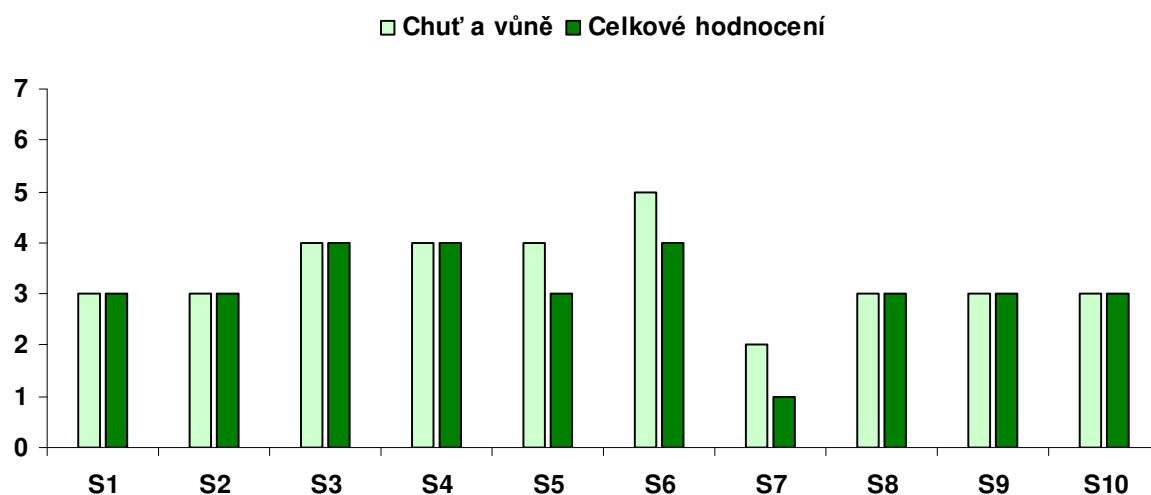
Celkem bylo hodnoceno 10 vzorků sypaných čajových směsí (S1-S10).

Cílem sensorického hodnocení sypaných čajových směsí bylo vyhodnotit chuť a vůni jednotlivých druhů čajů. Vzhledem k tomu, že se jednalo o poměrně neobvyklé druhy čajů velmi atraktivního složení (**Tabulka 7**), pozornost byla zvláště zaměřena na to, zda jednotlivé příchuti hodnotitelům chutnají nebo ne, zda budou některé z nich výrazně preferovat, zda jsou jednotlivé příchutě dostatečně intenzivní a zda budou schopni jednotlivé příchutě poznat a popsat. Hodnoceny byly výluhy čajových směsí, které byly připraveny podle návodu na obalu produktu, tak jak to odpovídá běžné konzumaci. Jak již bylo zmíněno výše, pro sensorické hodnocení sypaných čajových směsí byl použit částečně odlišný přístup, než pro ostatní vzorky. Chuť, vůně a celková kvalita jednotlivých nápojů byly hodnoceny pomocí hédonické stupnice 1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelný, profilové testy chuti a vůně podle intenzitní stupnice 1 neznatelná intenzita \Rightarrow 7 velmi silná intenzita. Sensorického hodnocení bylinných

sypaných čajových směsí se zúčastnilo 15 hodnotitelů. Dotazník použitý pro hodnocení sypaných čajových směsí je uveden v Příloze F.

Výsledky hodnocení podle stupnice

V testu hodnocení pomocí sedmibodové hédonické stupnice byla u sypaných čajových směsí hodnocena kategorie chuť a vůně a poté celková sensorická kvalita vzorku (**Obrázek 24**) vypovídající o jeho celkové přijatelnosti.



Obr. 24 Srovnání celkové přijatelnosti chuti a vůně vzorků sypaných čajů a srovnání celkové sensorické kvality vzorků sypaných čajů. Použitá stupnice: 1 vynikající \Rightarrow 7 nepříjemná. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 7.

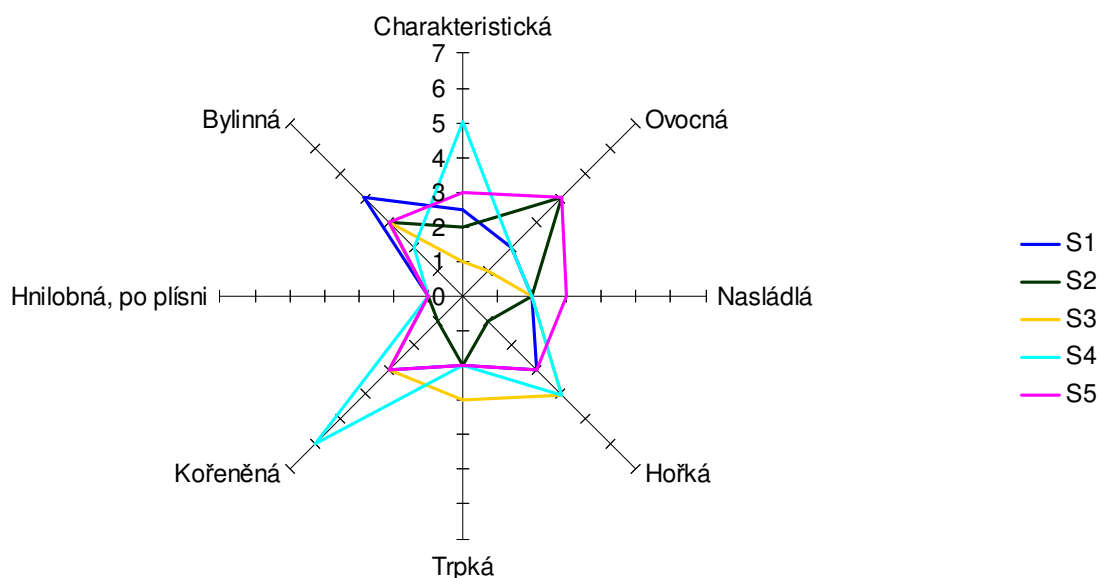
Mezi vzorky byly nalezeny statisticky významné ($P < 0,05$) rozdíly v přijatelnosti chuti i vůně a v celkové kvalitě vzorků. Z **Obrázku 16** je patrné, že jako nejlepší vzorek byl hodnotiteli označen vzorek S7 z hlediska vůně, chuti i celkové sensorické kvality. Jedná se o Rooibos s kousky citrónové kůry a skořice. Nápoj připravený z této byliny neobsahuje kofein, má nižší obsah tříslovin a obsahuje stopové prvky. Koch a kol. [175] ve své studii popsali „charakteristickou“ sensorickou kvalitu nápoje Rooibos jako směs medového, dřevitého, bylinného a květinového flavouru s mírně nasládlou chutí. Hodnocený vzorek S7 byl aromatizován citrónovou kůrou a skořicí, která byla v rámci hodnocení charakteristické chuti a vůně identifikována 10-ti hodnotiteli (**Tabulka 102, 103**). Vzorky S1, S2, S8, S9 a S10 byly hodnoceny jako velmi dobré z hlediska jejich chuti, vůně a celkové kvality. Naopak nejhůře byl hodnocen vzorek S6, jeho vůně a chuť byly označeny jako méně dobré, ale celková kvalita se jevila jako dobrá. Také se jedná o Rooibos, ale s vyšším zastoupením aromatických ingrediencí, a tak je pravděpodobné, že nemohl vyniknout jeho specifický flavour. Velmi podobné hodnocení získal vzorek S3, z hlediska vůně a chuti byl označen dobrým až méně dobrým, ale celkově byl tento vzorek hodnocen jako dobrý. Vzorky S6 a S3 obsahovaly papáju, kousky santalového dřeva a květy chrpy, jejichž kombinace také může přispívat k negativnímu hodnocení. Vůně, chuť a celková přijatelnost vzorku byly hodnoceny

velmi různorodě v závislosti na tom, co komu chutná a co preferuje. Vzorčky byly podávány teplé (45 °C) a neoslazené, tak aby co nejvíce vynikla jejich charakteristická chuť.

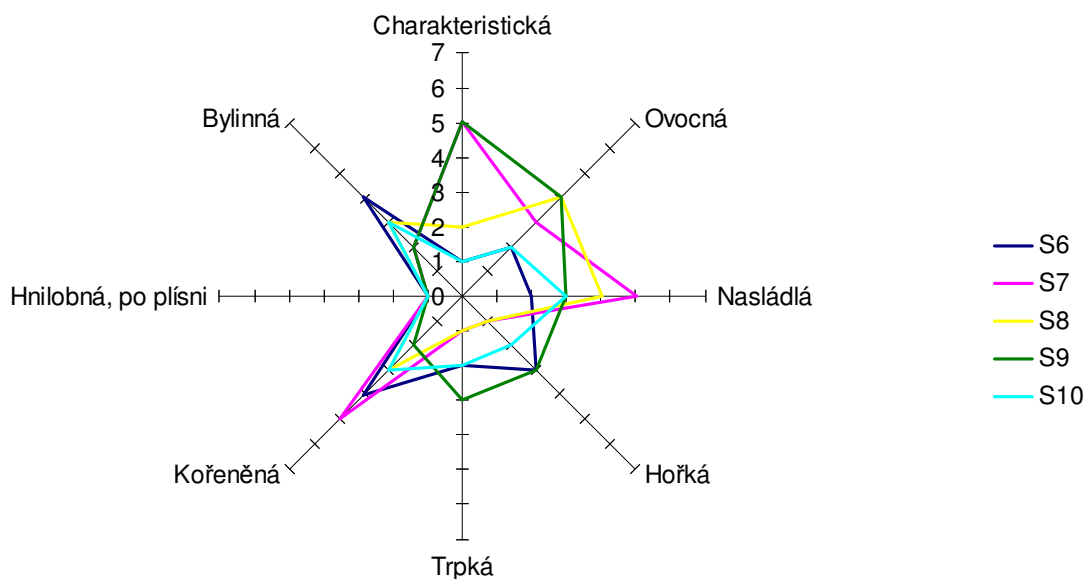
Výsledky profilového testu

Pro bližší popis chuti a vůně byly vzorky hodnoceny profilovým testem. V tomto testu hodnotitelé posuzovali, jakou intenzitou přispívá vybraný deskriptor k celkovému vjemu chuti (ovocná, nasládlá, hořká, trpká, kořeněná, hnilobná, bylinná, charakteristická), popř. vůně (charakteristická, ovocná, bylinná) jednotlivých čajových směsí. Vizualizace sensorických profilů jednotlivých vzorků jsou znázorněny pomocí hvězdicových grafů na **Obrázku 25-28**. Pro lepší názornost grafického vyjádření byly vzorky rozděleny na 2 skupiny.

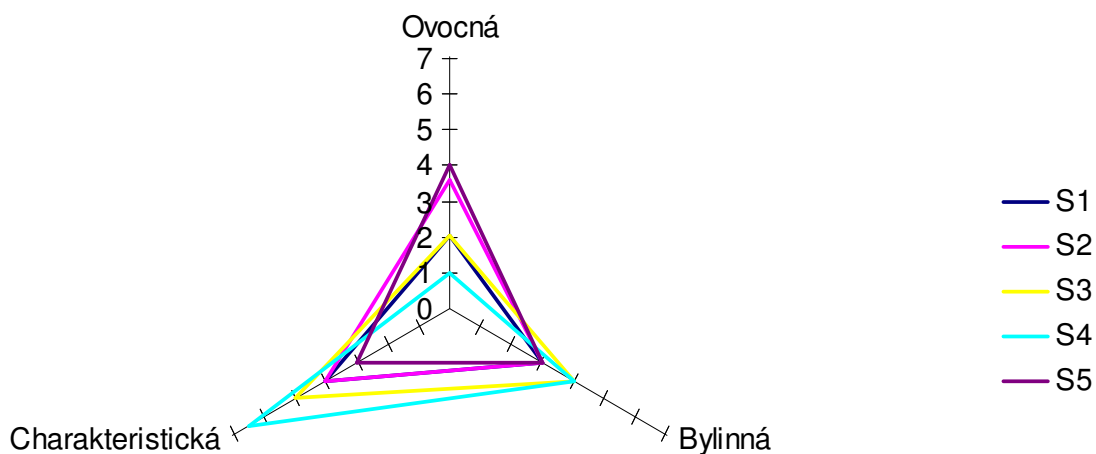
Vzhledem k tomu, že se jednalo o čaje velice různorodého složení, profil chuti i vůně jednotlivých vzorků se podle očekávání významně ($P < 0,05$) odlišoval (grafy na **Obrázku 25-28**). Podle složení u vzorků většinou dominovala buď bylinná/kořeněná (S1, S4, S6 a S7) nebo ovocná (S2, S5, S8 a S9) chuť a vůně.



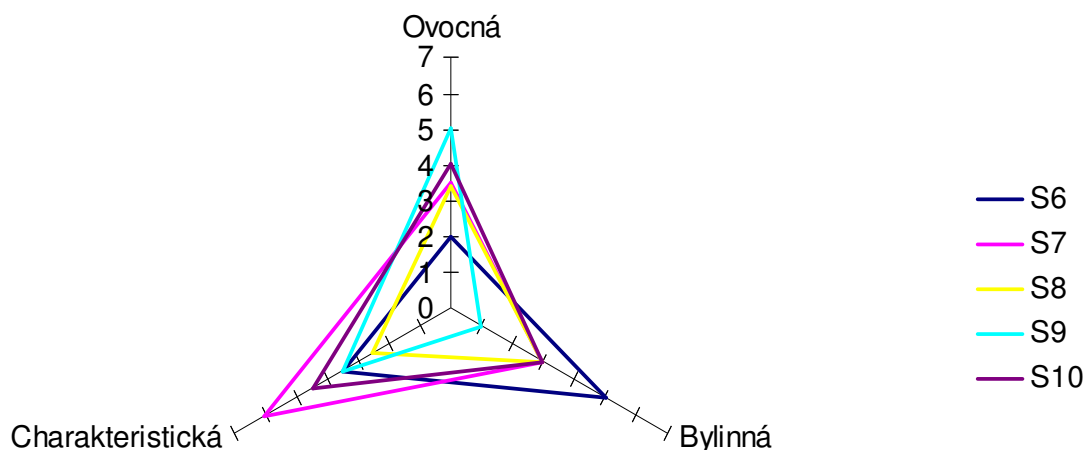
Obr. 25 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chutí pro vzorky sypaných čajů S1-S5. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 7.



Obr. 26 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chutí pro vzorky sypaných čajů S6-S10. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 7.



Obr. 27 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky sypaných čajů S1-S5. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 7.



Obr. 28 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky sypaných čajů S6-S10. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 7.

Hodnotiteli identifikované charakteristické chuti a vůně jsou uvedeny v **Tabulce 104, 105**.

U vzorku S1 (složení pravý černý čaj, rozinky, kousky pomerančové kůry, plátky mandlí, kousky bílé čokolády, aroma amaretta, aroma, květy šafránu) hodnotitelé správně identifikovali chuť a vůni mandlí, použité ovoce popisovali překvapivě jako meruňka nebo třešeň/višeň.

Chuť i vůni čaje S2 (složení slupky šípku, kousky jablek, ibišek, guarana, lístky ostružníku a meduňky, vousatka citronová, aroma) hodnotitelé popisovali správně po bylinkách, někteří cítili mátovou a citronovou.

U vzorku S3 (složení mate, kousky papáji, aroma, plody Goji, kousky malin, kousky divizny, listy ginkgo, kousky santalového dřeva, květy chrpy) hodnotitelé popisovali chuť zeleného čaje, dále cítili např. mátu nebo vanilku.

Ve vzorku S4 (složení pražené mate, kousky zázvoru, aroma, plátky pomeranče, bílý pepř, plody Goji, červený pepř, květy pivoňky, kousky santalového dřeva, chilli papričky, květy bodláku a slunečnice) hodnotitelé správně cítili chuť zázvoru, pepř a citrus. Vůni popisovali obecněji jako bylinky nebo koření.

V čaji S5 (složení černý čaj Pu-Ehr, šípkové oplodí, kousky jablka, zelené mate, aroma, vousatka citrónová) hodnotitelé cítili jahody, méně třešeň a jiné druhy ovoce.

Ve vzorku S6 (složení rooibos, kousky pomerančové kůry a papáje, aroma, červený pepř, kousky santalového dřeva, zázvoru a ženšenu, květy pomerančovníku, chrpy a levandule) hodnotitelé správně cítili ženšen, někteří popisovali obecně chuť a vůni bylin, koření.

U vzorku S7 (složení Rooibos, kousky citrónové kůry, aroma, kousky skořice) hodnotitelé správně identifikovali skořici, hřebíček nebo obecně koření.

Ve vzorku S8 (složení rooibos, rakytník řešetlákový, aroma, květy slunečnice a bodláku) hodnotitelé cítili med, bylinky a některé druhy ovoce.

U vzorku S9 (složení černý čaj, květy růže, rozinky, kousky meruňky a manga, aroma) hodnotitelé nejčastěji cítili chuť a vůni po jahodách, někteří ji popisovali obecně jako ovoce, pouze jeden hodnotitel poznal mango.

V čaji S10 (složení pravý černý čaj, plátky citrónu, vousatka citrónová, přírodní aroma, kousky zázvoru, pepř bílý, květy kaktusu, červený pepř, kousky santalového dřeva, listy Aloe,

květy bodláku) hodnotitelé správně identifikovali citron a zázvor, někteří uváděli obecně bylinky.

Tabulka 104 Seznam výrazů pro deskriptor „charakteristická“ chuť, tj. chuť, která podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 7.

Charakteristická chuť	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10
skořice				3			10			
mandle	4									
zázvor				3						1
ovoce	2							1	2	
jahoda					6				2	
citrón		1		1	1	1		1		7
máta		4	1	1		1				
ženšen						1				
bez		1								
šalvěj	1									
pomeranč				1	1		1	1	1	
pálivá, chilli, pepř				8					1	
meruňka	1									
zelený čaj	1		3							
hřebíček				2			2			
mango									1	
vanilka			1				1			
med								2		
bylinná		1			2	2		1	1	2
třešně, višně	1				1			1		
lesní ovoce					1				1	
kořeněná				1		1	2			

Tabulka 105 Seznam výrazů pro deskriptor „charakteristická“ vůně, tj. vůně která podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 7.

Charakteristická vůně	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10
skořice				1			11			
mandle	4									
bylinná	1	1		1		3		2		
ovoce									3	
jahoda					5			1	2	
citron		2	1			1		1		7
máta		4	2			1				
rooibos								2		
kořeněná				10		2	2			

Tabulka 105 Seznam výrazů pro deskriptor „charakteristická“ vůně, tj. vůně která podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 7 - pokračování

květinová		1	1						
vanilka			1						
med					1			2	1
třešně, višně	1				2				
angrešt, rybíz		3							
hruška			1						
ibišek	1							1	
jasmín			1						
hřebíček				2			1		
šípek	1	1			1				
ananas								2	

5.6.2.2 Instantní a sáčkové čajové směsi

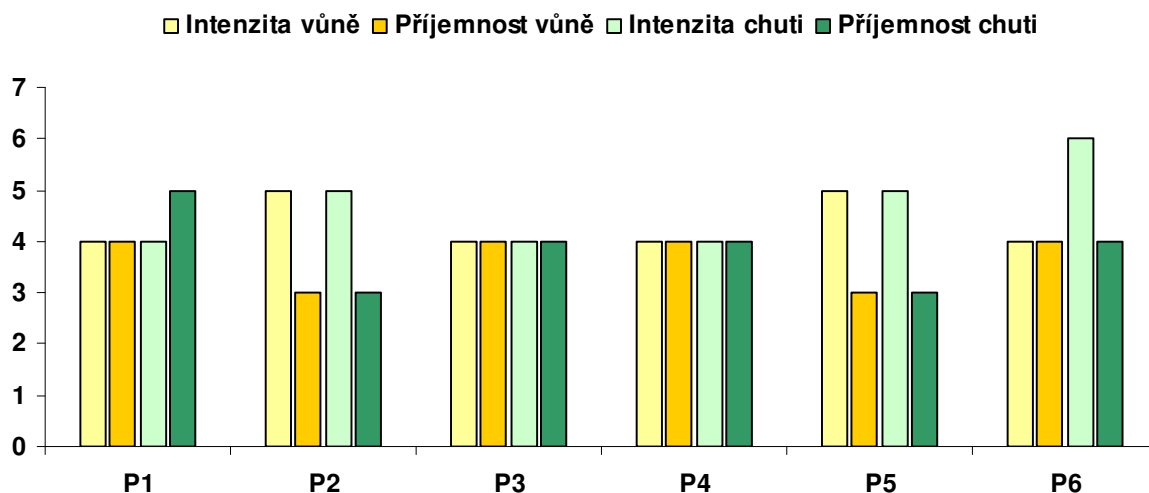
Celkem bylo hodnoceno 6 vzorků čajových směsí (P1-P6). Cílem sensorického hodnocení instantních čajových směsí a porcovaných směsí v sáčcích bylo vyhodnotit intenzitu a příjemnost vůně a chuti, stanovit jejich sensorické profily pomocí vybraných deskriptorů a také sledovat časové dozrívání chuti. Jako v případě sypaných čajových směsí bylo hodnocení zaměřeno na to, zda jednotlivé příchuti hodnotitelům chutnají nebo ne, zda jsou jednotlivé příchutě dostatečně intenzivní a charakteristické pro daný nápoj. Před samotným hodnocením byl testován postoj hodnotitelů k těmto nápojům z hlediska oblíbenosti. 77 % hodnotitelů má ovocné aromatizované čaje velmi rádo a 23 % hodnotitelů uvedlo, že je příliš rádo nemá, přičemž nikdo z účastníků neodpověděl, že tyto nápoje nemá vůbec rád.

Hodnoceny byly čajové výluhy popř. rozpuštěné instantní směsi čajů, které byly připraveny podle návodu na obale produktu, tak jak to odpovídá běžné konzumaci.

Intenzita vůně a chuti jednotlivých nápojů a intenzita jednotlivých deskriptorů byly hodnoceny pomocí stupnice 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná, příjemnost vůně a chuti byly hodnoceny pomocí stupnice 1 vynikající \Rightarrow 7 nepříjemná. Dotazník použitý pro hodnocení porcovaných čajových směsí je uveden v Příloze G.

Výsledky hodnocení podle stupnice

Podle sedmibodové hédonické stupnice byly vzorky instantních a porcovaných čajových směsí hodnoceny z hlediska intenzity a příjemnosti celkové vůně a chuti. Výsledky jsou zobrazeny na **Obrázku 29**.



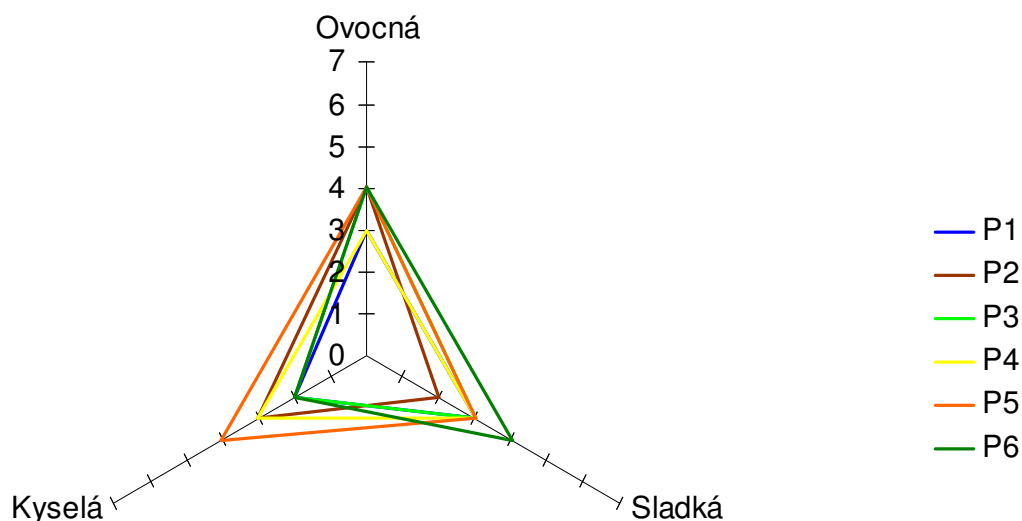
Obr. 29 Srovnání intenzity a příjemnosti vůně a chuti vzorků instantních a porcovaných čajů. Použitá stupnice pro intenzitu vůně a chuti: 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná. Použitá stupnice pro příjemnost vůně a chuti: 1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelná. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 8.

Mezi vzorky nebyly nalezeny statisticky významné ($P \geq 0,05$) rozdíly v intenzitě ani příjemnosti chuti i vůně. Nicméně z grafického vyjádření na **Obrázku 29** je patrné, že malé rozdíly mezi vzorky existují. Silnější intenzita vůně a chuti dominovala u vzorků P2, P5 a P6. Z hlediska celkové příjemnosti vůně a chuti byly nejlépe hodnoceny vzorky P2 a P5 a to jako velmi dobré. Jedná se o vzorky instantních čajů, které mají na své etiketě uvedeno přírodní aroma a jsou původem ze Švýcarska. Výrobce těchto produktů se opírá o přírodní léčitelství, zdravou výživu a dává přednost přírodním vůním. Ostatní vzorky dosahovaly střední intenzity vůně a chuti a také příjemnost těchto znaků byla hodnocena jako dobrá. Nejhůře byl hodnocen vzorek P1 z hlediska celkové přijatelnosti chuti, která byla označena jako méně dobrá. K negativnímu hodnocení může přispívat nesprávný poměr složení jednotlivých ingrediencí nebo také jejich nesprávná kombinace.

Výsledky profilového testu

Podobně jako u ostatních vzorků byla i u instantních a porcovaných čajů hodnocena intenzita vybraných deskriptorů pomocí profilového testu. Jak pro chuť, tak vůni bylo vybráno šest deskriptorů (charakteristická, ovocná, sladká, kyselá, jiná příjemná a jiná nepříjemná). Tyto deskriptory byly hodnoceny pomocí intenzitní stupnice 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná. Hvězdicové grafy na **Obrázku 30 a 31** prezentují výsledky senzoričeských profilů šesti druhů čajů (instantní a sáčkové ovocné čaje).

Z grafického vyjádření vůně je patrné, že znázorněné atributy dosahují spíše slabší intenzity a mezi vzorky nejsou významné ($P \geq 0,05$) rozdíly (**Obrázek 30**). V profilovém testu měli hodnotitelé u vůně vzorků blíže uvést charakteristickou, jinou příjemnou a jinou nepříjemnou vůni. Jejich intenzita byla hodnocena buď stupněm 1-2 (neznatelná, velmi slabá), anebo nebyla hodnotiteli uvedena vůbec. Proto je uvedena **Tabulka 106** s charakteristickým popisem těchto deskriptorů, které hodnotitelé určili. Většinou hodnotitelé uváděli konkrétní druh ovoce. Kategorie „jiná nepříjemná vůně“ byla popisována zřídka.



Obr. 30 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky porcovaných a instantních čajů P1-P6. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 8.

Tabulka 106 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná“ vůně, tj. vůně, která podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 8.

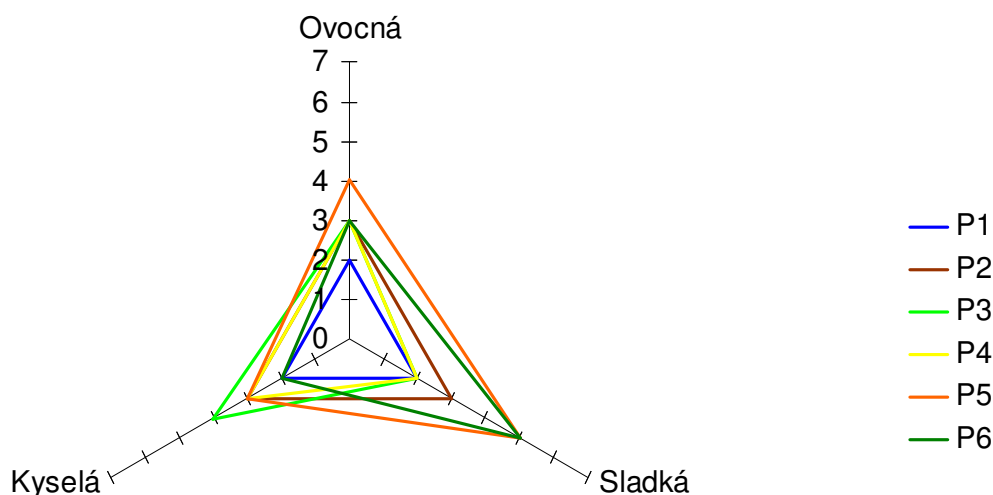
Profilový test vůní		P1	P2	P3	P4	P5	P6
Charakteristická	lesní ovoce	4		1	1		
	malina	1		3			
	třešeň/višeň	1			2		
	šípek	1		1			
	mrkev	1					
	rybíz	1					
	brusinka	1		1			
	zázvor		1				
	citrón		7		1	8	2
	meduňka		1				1
	jahoda			6			
	ostružina			1	2		
	broskev						2
	ananas						1
	meruňka					1	
	pomeranč				1		
	ovocná směs				2		
mango				1		1	

Tabulka 106 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná“ vůně, tj. vůně, která podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 8 - pokračování

Jiná, příjemná	čajová	1					
	bylinková		1			1	1
	žvýkačková			1			
	svěží	1	1		1	1	
	medová					1	
	sladký meloun						1
	bonbónová						1
Jiná, nepříjemná	umělá			1	1	1	
	hořká						1
	zemitá	1					

Významné ($P < 0,05$) difference mezi vzorky byly zaznamenány v hodnocení chuti, kde jsou opět graficky zpracovány pouze deskriptory ovocná, sladká a kyselá chuť. Intenzita ostatních deskriptorů byla hodnocena jako velmi slabá až neznatelná. Jak je vidět z uvedeného grafu (**Obrázek 31**), instantní čaje P2, P5, P6 jsou sladší než čaje sáčkové, které jsou naopak více kyselé. Ovocná chuť byla hodnocena podobně. Vzorek P5 byl hodnocen jako nejvíce ovocný a zároveň 8 hodnotitelů správně určilo z hlediska vůně a chuti, že se jedná o čaj citrónový (**Tabulka 107**). Nejslabší intenzitou chuti se vyznačoval vzorek P1 z Polska, který měl naopak nejpočetnější zastoupení ingrediencí.

Ve většině případů hodnotitelé rozpoznali charakteristické vůně a chuti předložených vzorků a podle výsledků dovedou snadno charakterizovat citrónový flavour (vzorek P2, P5, P6) a flavour lesního ovoce (vzorek P1) (**Tabulka 106, 107**).



Obr. 31 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chuti pro vzorky porcované a instantní čaje P1-P6. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=15$). Kódy vzorků viz Tabulka 8.

Tabulka 107 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná“ chuť, tj. chuť, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 8.

Profilový test chuti		P1	P2	P3	P4	P5	P6
Charakteristická	lesní ovoce	4		2			
	malina	1		3	1		
	třešeň/višeň	1			2		
	šípek	1					
	brusinka	1		1			
	zázvor		2				
	citrón		7	1		8	2
	meduňka		1				1
	jahoda	1		3	1		
	broskev					1	2
	meruňka					1	
	pomeranč				1		
	ovocná směs	1			1		
	mango				1		1
	bez	1					1
	bylinky		1				
med						1	
Jiná, příjemná	přírodní		1	1			1
	bonbónová					1	1
	citrónová tráva						1
	osvěžující						1
	melounová						1
	kořeněná				1		
	sladkokyselá			1			
Jiná, nepříjemná	hořká		1	1			1
	trpká					1	1
	zemitá	1					
	dřevitá	1			1		
	palčivá				1		
	umělá		1			1	

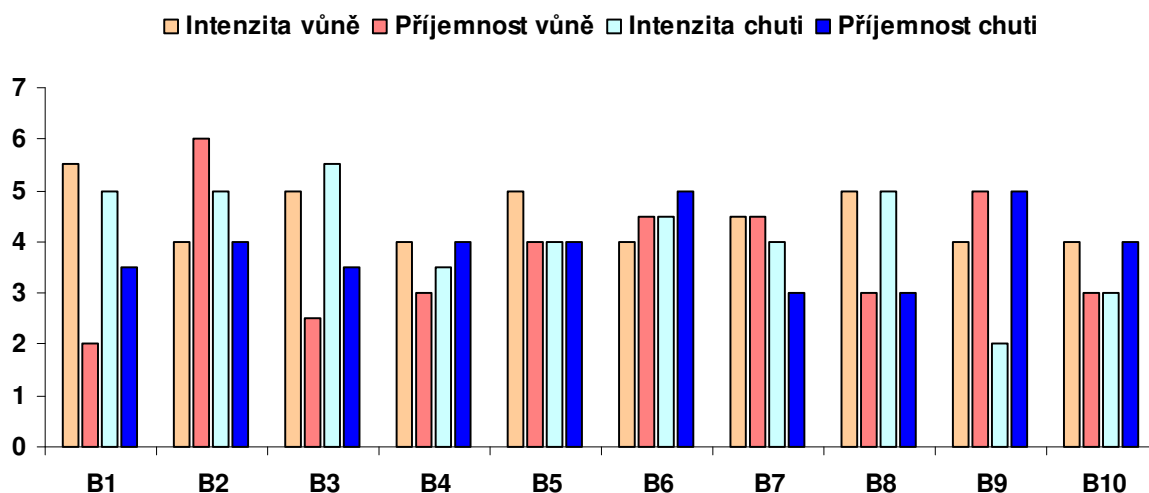
5.6.2.3 Želatinové bombóny

Senzorickému hodnocení bylo podrobena 10 vzorků želatinových bombónů jak českého výrobce, tak producentů zahraničních. Hodnocení těchto výrobků se zúčastnilo 16 hodnotitelů. Před samotným hodnocením byl testován postoj posuzovatele k těmto cukrovinkám z hlediska oblíbenosti konzumace. 14 hodnotitelů (87,5 %) uvedlo, že má želatinové bombóny velmi rádo. Pouze 2 hodnotitelé (12,5 %) přiznali, že tento typ bombónů nemá příliš rádo, přičemž nikdo z účastníků neodpověděl, že tyto sladkosti nemá vůbec rád.

K velké oblibě želatinových bombónů přispívá také fakt, že se na trhu objevují stále nové druhy těchto bombónů (s ovocnou šťávou, kyselé, sladké, pěnové aj.) deklarující použití přírodních barviv popř. aroma, jejich senzorická kvalita (chuť a vůně) je však velmi různorodá. Konzervativní český spotřebitel dává většinou přednost pouze jedné oblíbené značce, výrobci nebo chuti.

Výsledky hodnocení podle stupnice

V testu hodnocení pomocí sedmibodové hédonické stupnice byly vzorky želatinových bonónů hodnoceny z hlediska intenzity a příjemnosti celkové vůně a chuti. Jak je patrné z výsledků na **Obrázku 32** mezi vzorky byly nalezeny statisticky významné ($P < 0,05$) rozdíly.



Obr. 32 Srovnání intenzity a příjemnosti vůně a chuti vzorků želatinových bombónů B1-B10. Použitá stupnice pro intenzitu vůně a chuti: 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná. Použitá stupnice pro příjemnost vůně a chuti: 1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelná. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 9.

Z výsledků na **Obrázku 32** vyplývá, že nejintenzivněji voněl vzorek B1, který dosáhl intenzity silnější až dosti silné. Silnější intenzitou se také vyznačovaly vzorky B3, B5 a B8. Také z hlediska příjemnosti vůně dosáhl vzorek B1 výborného hodnocení a vzorky B3, B4, B8 a B10 byly hodnoceny jako velmi dobré. Naopak stupeň 6 „nevyhovující“ získal vzorek B2 z Nizozemska při hodnocení příjemnosti vůně. Výsledky hodnocení chutí želatinových bombónů byly relativně podobné jako u hodnocení vůně. Silnější intenzitou chuti se vyznačovaly vzorky B3, B1, B2 a B8; z hlediska příjemnosti chuti byl označen jako velmi dobrý až dobrý vzorek B7, B8, B1 a B3. Nejhůře byly hodnoceny vzorky B6 a B9, u nichž

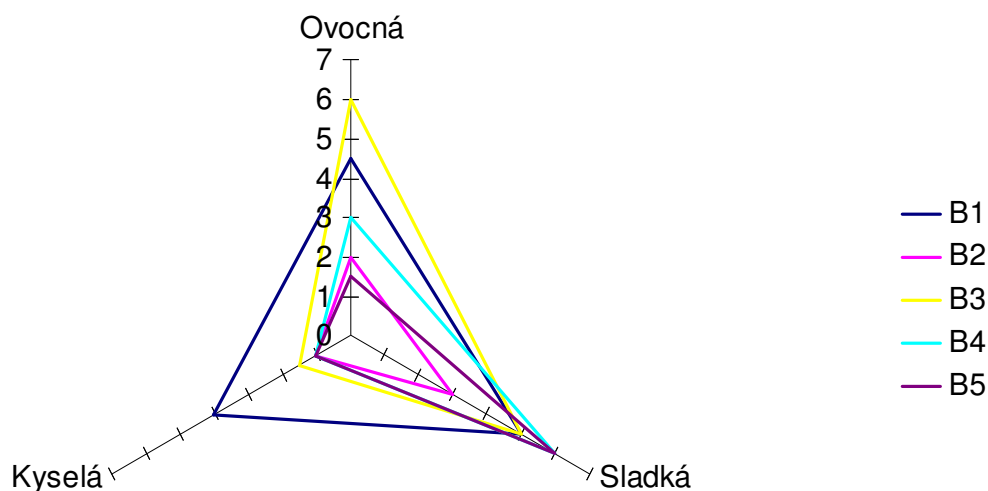
byla chuť hodnocena jako méně dobrá velmi slabé až střední intenzity. Z hlediska hédonického byl nejlépe hodnocen český vzorek B1, pěnové želé s jahodovou příchutí.

Výsledky profilového testu

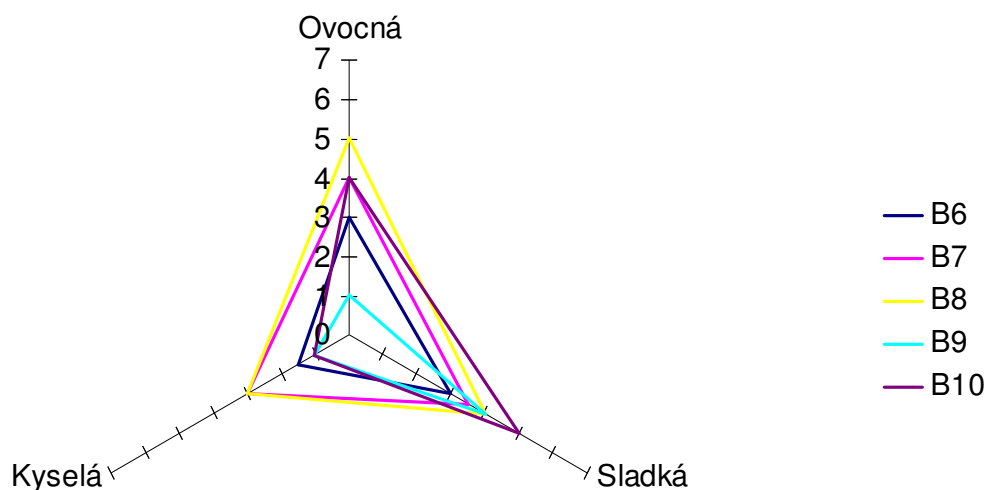
Pro bližší a lepší posouzení flavouru předložených cukrovinek měli hodnotitelé posoudit, která z vybraných vůní (ovocná, sladká, kyselá) a chutí (charakteristická, ovocná, sladká, kyselá, umělá) nejvíce přispívá k celkovému flavouru jednotlivých želatinových bonbónů. Deskriptor „chuť umělá (po plastech)“ byl pro hodnocení želatinových bonbónů vybrán, poněvadž u některých těchto produktů je zřetelně patrný, zvláště pokud jsou vyrobeny z méně kvalitních syntetických ingrediencí. V kategorii „jiná“ (příjemná, nepříjemná) chuť měli hodnotitelé uvést jakýkoliv další deskriptor, který jim připadá výrazný. Tyto deskriptory však uváděli zřídka, většinou v neznatelné intenzitě nebo je nepoznali vůbec, proto jsou graficky zpracovány pouze výsledky deskriptorů ovocná, sladká, kyselá chuť a/nebo vůně a popř. umělá chuť. Vizualizace sensorických profilů jednotlivých vzorků jsou znázorněny pomocí hvězdicových grafů na **Obrázku 33-36**. Pro lepší názornost grafického vyjádření byly vzorky rozděleny na 2 skupiny. Hodnotiteli identifikované charakteristické chutě jsou uvedeny v **Tabulce 108**.

Profily vůně (**Obrázek 33, 34**) a chuti (**Obrázek 35, 36**) jednotlivých vzorků bonbónů se významně ($P < 0,05$) odlišovaly.

Téměř všechny vzorky měly silnější sladkou vůni. Kyselá vůně byla označena jako slabá, u některých vzorků neznatelná. Intenzita ovocné vůně byla kolísavá, přičemž nejintenzivnější ovocnou vůni měl český vzorek B3, želé s ovocnou šťávou. U vzorků B9 a B5 byla naopak ovocná vůně neznatelná (**Obrázek 33, 34**).



Obr. 33 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky želatinových bonbónů B1-B5. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 9.



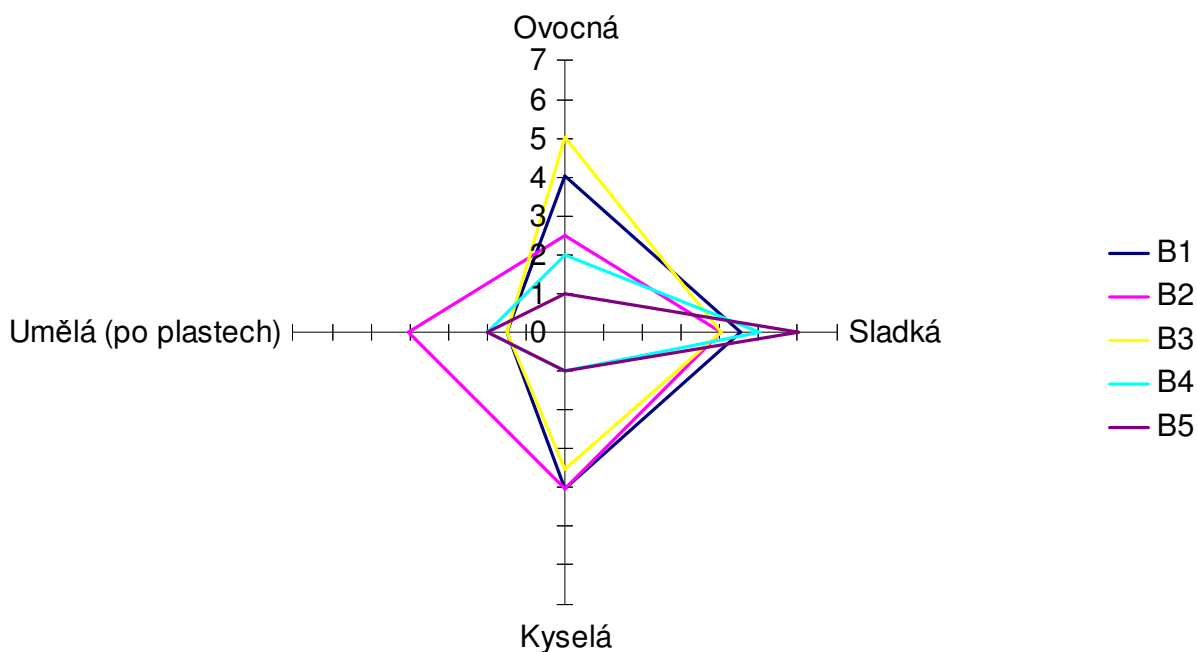
Obr. 34 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky želatiových bonbónů B6-B10. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 9.

Mezi atributy chuti dominovala sladká chuť, která dosahovala u všech vzorků silnější intenzity (**Obrázek 35, 36**). Jako nejsladší byl označen vzorek B5 a dále vzorky B4, B8 a B10. Vzorky B1, B2, B3 a B6 byly naopak vnímány jako více kyselé.

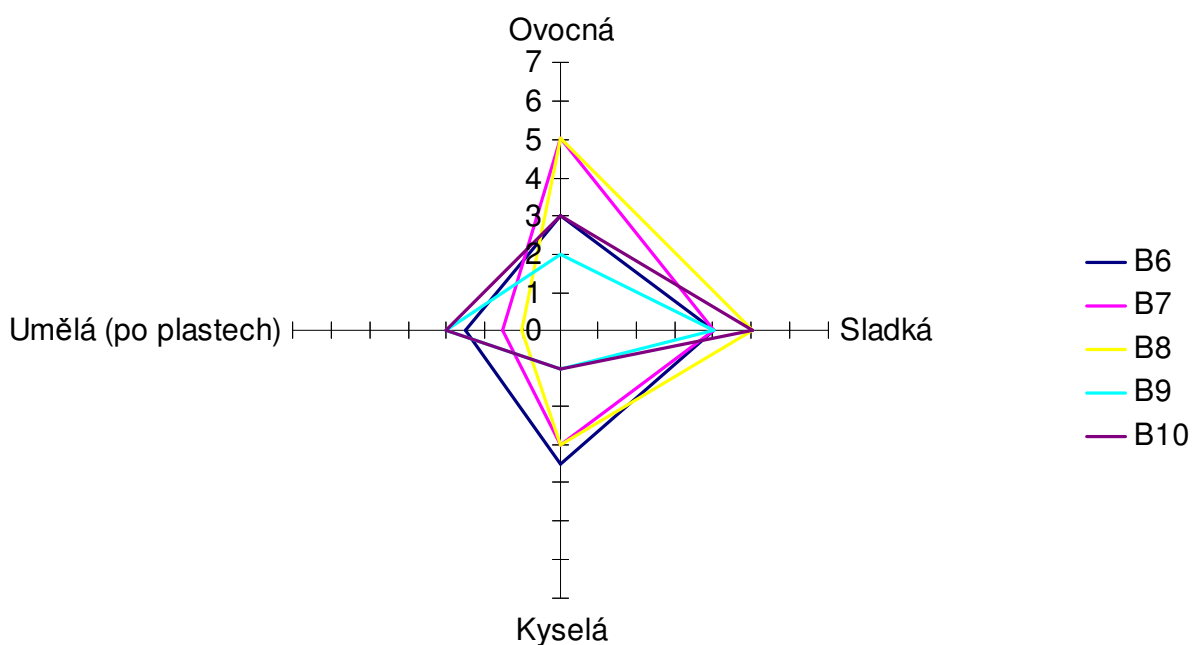
U vzorků B1, B3, B7 a B8 k celkovému vjemu chuti přispívala výrazněji také chuť ovocná (silnější intenzita). Jedná se o vzorky pestřejšího složení s přidavkem přírodních ovocných koncentrátů. Naopak u vzorků B4 a B9 byla ovocná chuť velmi slabá, u vzorku B5 dokonce nezatelná.

Chuť umělá (po plastech) byla většinou slabá až nezatelná, což je v pořádku, neboť se jedná o nežádoucí off-flavour. Pouze u vzorku B2 byla umělá chuť vnímána ve vyšší intenzitě (střední), což souvisí i s nepřilíš dobrým hodnocením celkové chuti, jeho celková vůně byla dokonce hodnocena jako nevyhovující (**Obrázek 32**).

Popis deskriptorů v kategorii jiná příjemná a nepříjemná chuť (**Tabulka 108**) dělal hodnotitelům obtíže v porovnání s hodnocením čajových směsí. Hodnotitelé většinou nevedli žádný další deskriptor nebo ho uvedli chybně. Co se týče deskriptoru jiná příjemná chuť u vzorku B3 někteří hodnotitelé správně rozpoznali višňu a malinu, u vzorku B4 uváděli vanilku, u vzorku B7 jahodu. U vzorků B6 a B7 byla zmíněna plastová chuť (off-flavour), ale pouze ve velmi slabé intenzitě. Za zmínku stojí vzorek B9, jehož aroma výrobce uvádí jako tutti frutti s extraktem světlé barvířské, který byl hodnocen velmi špatně i z hlediska celkové chuti a vůně (**Obrázek 32**). Hodnotitelé u něj detekovali off-flavour, který popisovali jako mouka, škrob a/nebo guma.



Obr. 35 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chutí pro vzorky želatinových bonbónů B1-B5. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 9.



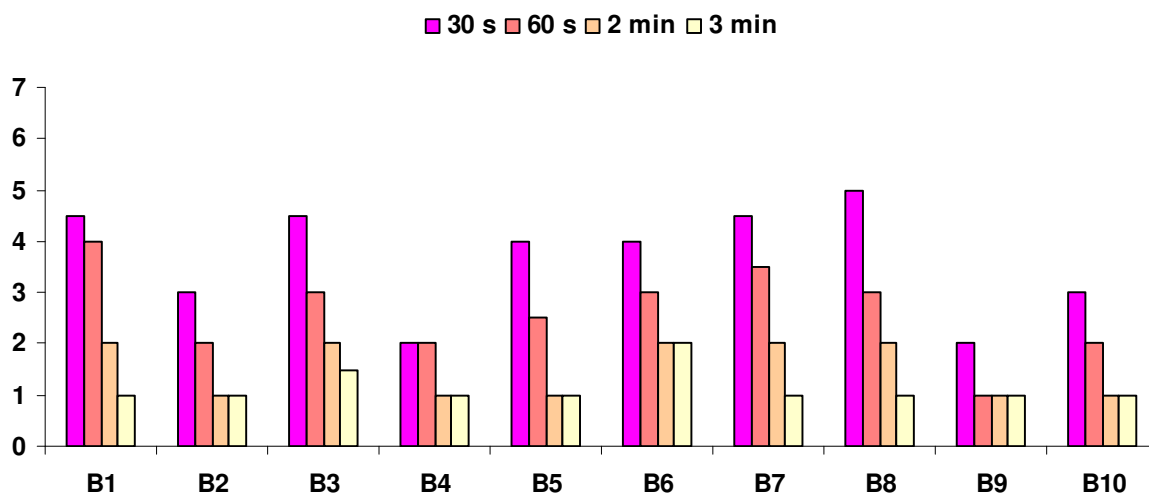
Obr. 36 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chutí pro vzorky želatinových bonbónů B6-B10. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 9.

Tabulka 108 Seznam výrazů pro deskriptory „jiná příjemná a jiná nepříjemná“ chuť, tj. chuť, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 9.

Profilový test chuti		B1	B2	B3	B4	B5	B6	B7	B8	B9	B10
Jiná, příjemná	malina	1	1	2							
	lesní směs			1							
	višeň			2							
	jahoda				1			3			1
	vanilka				6						
	marcipán				1						
	jablko						1				
	borůvka								1		
	karamel					1					
	ovocná směs						1				
Jiná, nepříjemná	plastová		1				1	1			
	ocet		1								
	mouka									1	
	škrob									1	
	guma								1	1	

Časové doznívání chuti

Pro získání komplexního popisu flavouru vzorků bylo na závěr hodnoceno také časové doznívání chuti. Hodnotitelé měli za úkol vzorky zkonzumovat a po dobu 3 minut v určených časových intervalech zaznamenávat intenzitu vnímání příjemné chuti. Jak je patrné z **Obrázku 37**, intenzita se podle očekávání postupně snižovala. U pěti vzorků byla chuť neznatelná už po dvou minutách žvýkání, po třech minutách byla chuť neznatelná u všech vzorků. Intenzita nepříjemné chuti byla po vymezenou dobu u všech vzorků hodnocena jako velmi nízká (neznatelná). Jiná (tzv. následná) chuť po 3 minutách nebyla hodnotiteli identifikována u žádného vzorku ve vnímatelné intenzitě.



Obr. 37 Časové doznívání intenzity charakteristické (příjemné) chuti vzorků želatinových bonbónů. Kódy vzorků viz Tabulka 9.

5.6.2.4 Žvýkáci gummy

Celkem bylo hodnoceno 5 vzorků žvýkáčích gum s různými druhy ovocných příchutí (G1-G5). Cílem sensorického hodnocení bylo vyhodnotit chuť a vůni jednotlivých vzorků. Při hodnocení chuti hodnotitelé vzorky vkládali do úst a pravidelně žvýkali, jak je obvyklé při konzumaci. Hodnotili okamžitý vjem chuti a její časové doznívání během požadované doby 3 min, poté žvýkačku vyplivli. Pozornost byla zaměřena na to, zda jsou příchutě dostatečně intenzivní, chutnají příjemně, vydrží v ústech delší dobu a zda budou hodnotitelé schopni jednotlivé příchutě poznat a popsat. Dotazník použitý pro hodnocení žvýkáčích gum je uvedený v Příloze G.

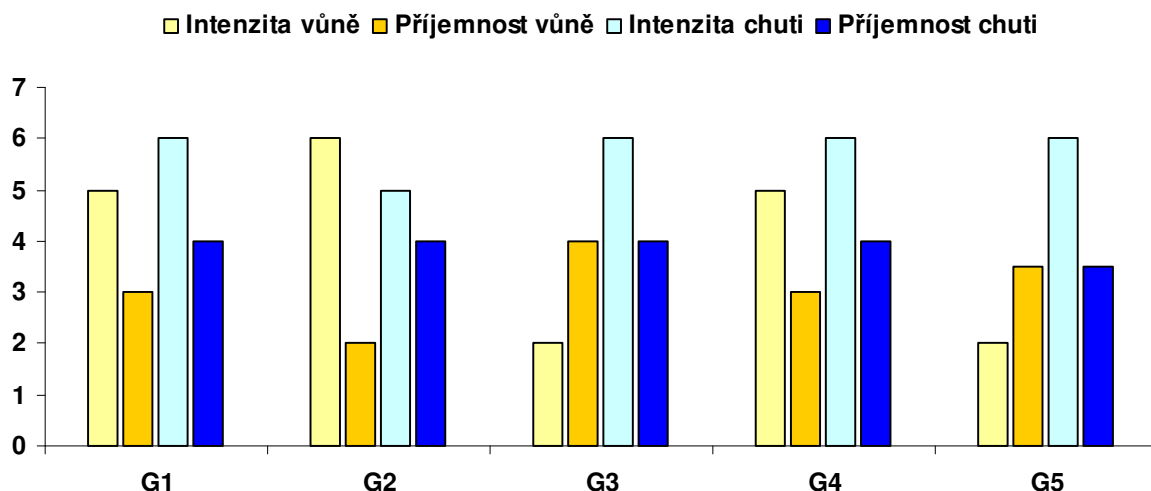
Před samotným hodnocením byl testován postoj hodnotitelů k ovocným žvýkačkám. Sensorického hodnocení se zúčastnilo 16 hodnotitelů, z toho 11 hodnotitelů (68,75 %) nemá ovocné žvýkáci gummy příliš rádo, 4 hodnotitelé (25 %) nemají ovocné žvýkáci gummy vůbec rádi a pouze 1 hodnotitel (6,25 %) uvedl, že ovocné žvýkačky má velmi rád.

Výsledky hodnocení podle stupnice

V testu hodnocení pomocí sedmibodové stupnice byly vzorky ovocných žvýkáčích gum hodnoceny z hlediska intenzity a příjemnosti celkové vůně a chuti. Výsledky jsou zobrazeny na **Obrázku 38**.

Mezi vzorky byly nalezeny statisticky významné ($P < 0,05$) rozdíly v intenzitě vůně, vzorky G3 a G5 měly výrazně nižší intenzitu vůně (označenou jako velmi slabou). V intenzitě chuti a příjemnosti chuti a vůně byly rozdíly nepatrné. Intenzita chuti vzorků byla vnímána dosti silně, příjemnost chuti a vůně jako dobrá až velmi dobrá.

Z **Obrázku 38** je patrné, že intenzita vůně vzorků G1, G2 a G4 byla silnější až dosti silná. Na druhou stranu intenzita chuti byla u všech vzorků hodnocena jako silnější až dosti silná. Při porovnání příjemnosti vůně a chuti byla vůně pro hodnotitele příjemnější tzn. velmi dobrá, příjemnost chuti byla vyhodnocena jako dobrá. Jako nejlepší by bylo možné označit vzorek G2 (dětská žvýkačka původem z Polska), který měl nejvíce příjemnou a intenzivní vůni a zároveň i dobrou chuť silnější intenzity.



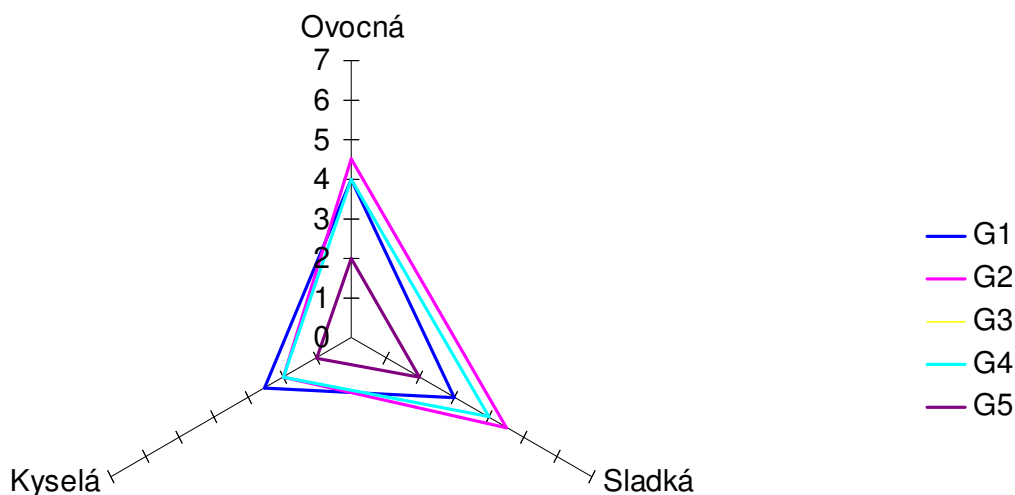
Obr. 38 Srovnání intenzity a celkové přijatelnosti vůně a chuti vzorků žvýkacích gum. Použitá stupnice pro intenzitu vůně a chuti: 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná. Použitá stupnice pro příjemnost vůně a chuti: 1 vynikající \Rightarrow 7 nepříjemná. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 10.

Výsledky profilového testu

Podobně jako u předchozích vzorků potravin, v rámci profilového testu jsou zpracovány pouze výsledky hodnocení deskriptorů ovocná, sladká a kyselá vůně a chuť. Charakteristická vůně a chuť byla ohodnocena pouze slovně (**Tabulka 109**), kategorie jiná příjemná a nepříjemná vůně a chuť nebyly hodnotiteli identifikovány vůbec.

Profil vůně jednotlivých vzorků žvýkaček se významně ($P<0,05$) odlišoval, pouze profily vůně vzorků G3 a G5 se překrývaly. Nejvíce ovocnou a sladkou vůni měl podle hodnotitelů vzorek G2, naopak ovocná a sladká vůně vzorků G3 a G5 byly označeny jako velmi slabé. Kyselá vůně byla ve všech případech velmi slabá až neznatelná.

Všechny vzorky žvýkacích gum byly s ovocnou příchutí. Při popisu charakteristické vůně hodnotitelé uváděli různé druhy ovoce, pouze u vzorku G4 většina hodnotitelů správně rozpoznala meloun (**Tabulka 109**).

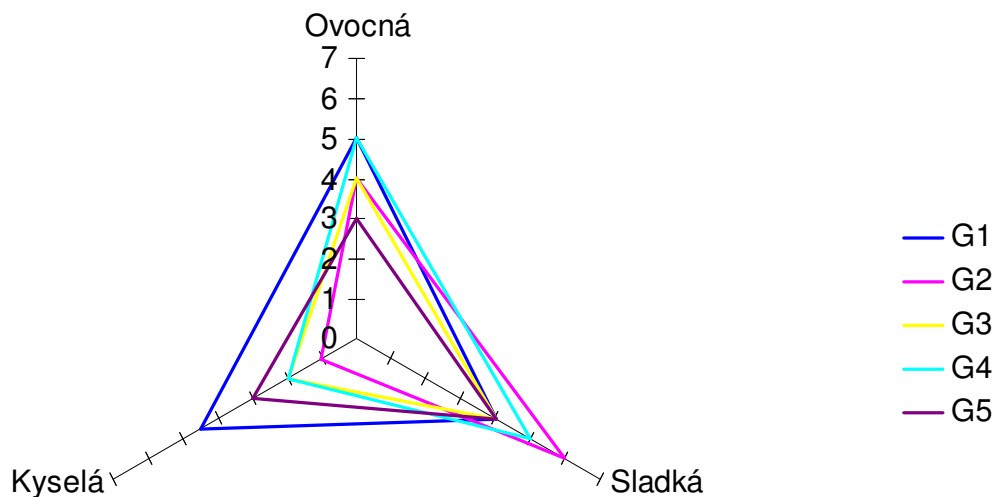


Obr. 39 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky žvýkacích gum G1-G5. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 10.

Tabulka 109 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická a jiná příjemná“ vůně, tj. vůně, která podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 10.

Profilový test vůní		G1	G2	G3	G4	G5
Charakteristická	meloun		2		7	
	jahoda	2	2		2	1
	broskev			1	1	
	malina	2			1	
	lesní ovoce	4				
	višeň		1	1		
	jablko		1	2	1	
	meruňka		1			
	exotické ovoce		2			
	máta	1				
	lékořice	1				
	černý rybíz	1				
	citrón				1	3

Také profily chutí jednotlivých vzorků se významně ($P<0,05$) odlišovaly. Z profilového testu vyplývá, že nejvíce ovocnou chuť měl vzorek G1 a G4, sladká chuť byla nejintenzivnější u vzorku G2 a nejvíce kyselou chuť měl vzorek G1. Jiné příjemné ani nepříjemné chuti nebyly u žvýkaček identifikovány. Slovní popis u charakteristické chuti byl podobný jako u charakteristické vůně. Hodnotitelé uváděli různé druhy ovoce, u vzorku G4 správně rozpoznali meloun, u vzorku G3 jablko, u vzorku G5 citrón (**Tabulka 110**).



Obr. 40 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chutí pro vzorky žvýkacích gum G1-G5. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 10.

Tabulka 110 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická a jiná příjemná“ chuť, tj. chuť, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 10.

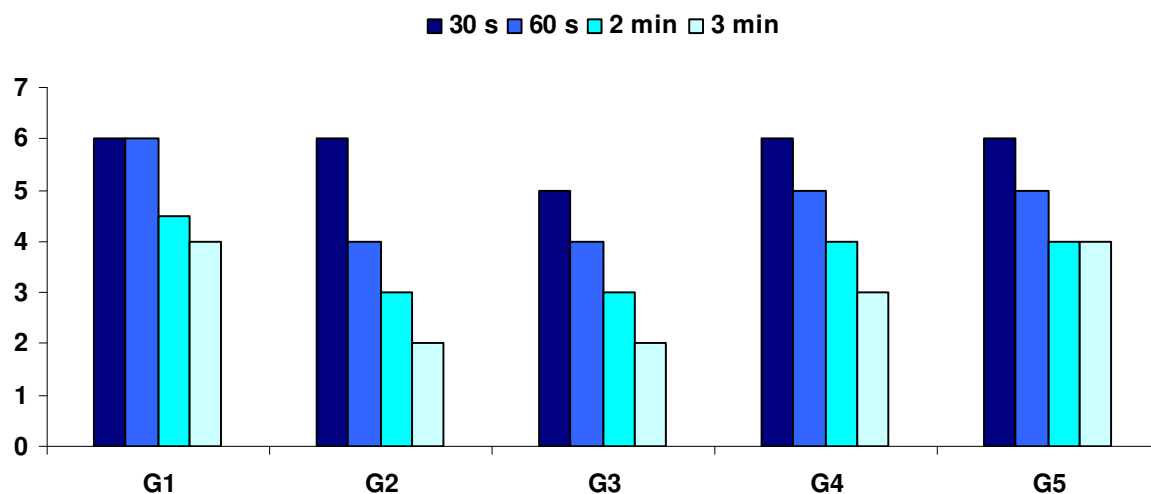
Profilový test chuti		G1	G2	G3	G4	G5
Charakteristická	meloun	2	1	3	7	2
	jahoda	1	2	1	2	
	hrozny				1	
	malina	1			1	
	jablko	1		4		
	třešně/višně	1	1			
	lesní směs	2				
	černý rybíz	1				
	ostružina	1				
	citrón	1				4
	meruňka			1		
	tutti frutti		1			
	broskev		1			
	máta	1				2
	ovocná směs		2			

Časové doznívání chuti

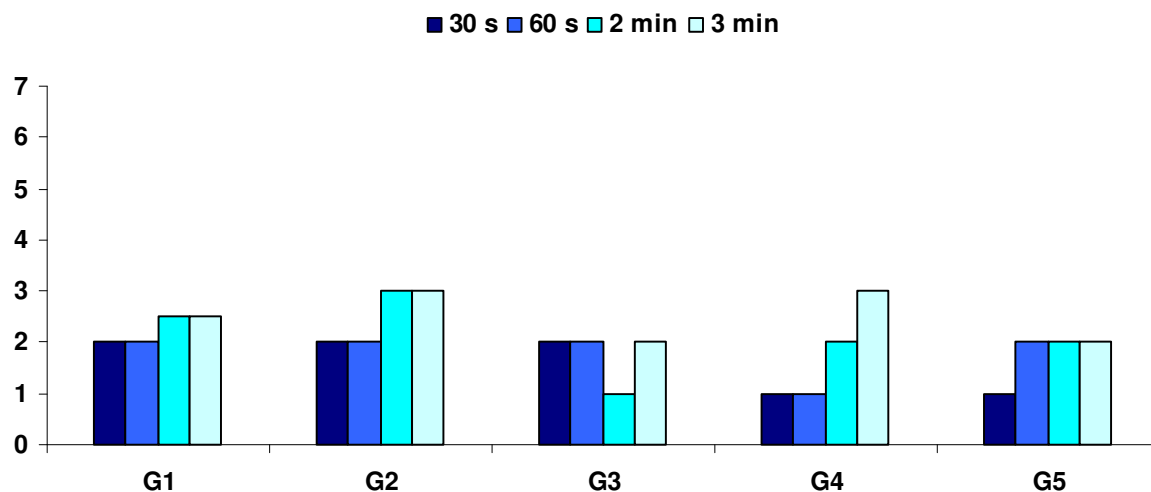
Zvláště u vzorků žvýkacích gum bylo významnou součástí sensorického hodnocení časové doznívání chuti. Hodnotitelé hodnotili intenzitu příjemné charakteristické a také příp. nepříjemné chuti v určených časových intervalech po dobu 3 minut. Po uplynutí stanovené doby měli navíc popsat konečný vjem chuti (příp. jiné pocity v ústech).

Časové doznívání chuti mělo podle očekávání klesající tendenci. Jak lze vidět z **Obrázku 41**, intenzita charakteristické chuti byla u všech vzorků na začátku dosti silná. Přestože podle očekávání by měla u žvýkaček charakteristická chuť vydržet mnohem déle než 3 minuty, po třech minutách žvýkání byla popisována jen jako slabá až velmi slabá.

U žvýkaček se také, na rozdíl od ostatních vzorků potravin, po určité době žvýkání objevila nepříjemná chuť (**Obrázek 42**), jejíž intenzita byla označena jako slabá. Pravděpodobně mohou hodnotitelé cítit gumový základ žvýkaček obsahující elastomery, plastifikátory a pryskyřice.



Obr. 41 Časové doznívání intenzity charakteristické (příjemné) chuti vzorků žvýkacích gum. Kódy vzorků viz Tabulka 10.



Obr. 42 Časové doznívání intenzity charakteristické (nepříjemné) chuti vzorků žvýkacích gum. Kódy vzorků viz Tabulka 10.

5.6.2.5 Alkoholické a nealkoholické nápoje

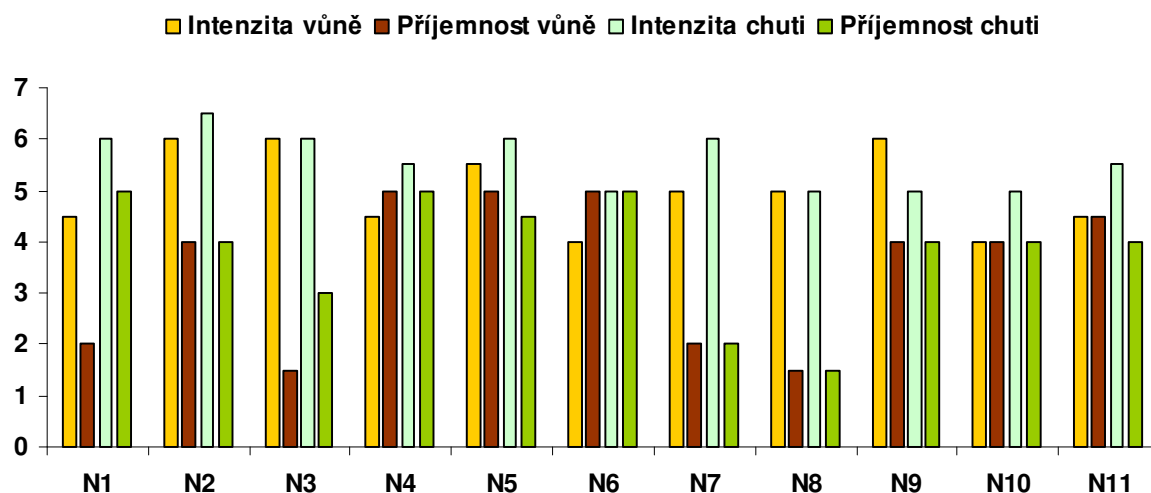
Celkem bylo hodnoceno jedenáct aromatizovaných ovocných nápojů, z toho šest alkoholických (N1-N6) a pět nealkoholických (N7-N11). Cílem sensorického hodnocení bylo vyhodnotit intenzitu a příjemnost vůně a chuti, stanovit profily flavouru pomocí vybraných deskriptorů a také sledovat časové dozrívání chuti.

Před samotným hodnocením byl testován postoj hodnotitelů k těmto nápojům z hlediska oblíbenosti. 93,75 % hodnotitelů má ovocné aromatizované nápoje velmi rádo, 6,25 % hodnotitelů uvedlo, že je příliš rádo nemá, přičemž nikdo z účastníků neodpověděl, že tyto nápoje nemá rád vůbec.

Intenzita vůně a chuti jednotlivých nápojů a intenzita jednotlivých deskriptorů byly hodnoceny pomocí stupnice 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná, příjemnost vůně a chuti byly hodnoceny pomocí stupnice 1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelná. Dotazník použitý pro hodnocení alkoholických a nealkoholických nápojů je uveden v Příloze G.

Výsledky hodnocení podle stupnice

Mezi vzorky byly nalezeny statisticky významné ($P < 0,05$) rozdíly v chuti i vůni. Z grafického vyjádření na **Obrázku 43** je patrné, že všechny vzorky dosahovaly silnější až dosti silné intenzity chuti i vůně. Příjemnost vůně a chuti byla hodnocena velmi různorodě a závisí to na tom, co komu chutná a co preferuje. Nejpříjemněji voněl a chutnal nealkoholický nápoj N8 a N7, oba tyto nápoje měly na obalu deklarován přídavek přírodních ovocných koncentrátů. Naopak nejméně příjemnou vůni a chuť měl vzorek N4, N5 a N6 původem z České republiky.



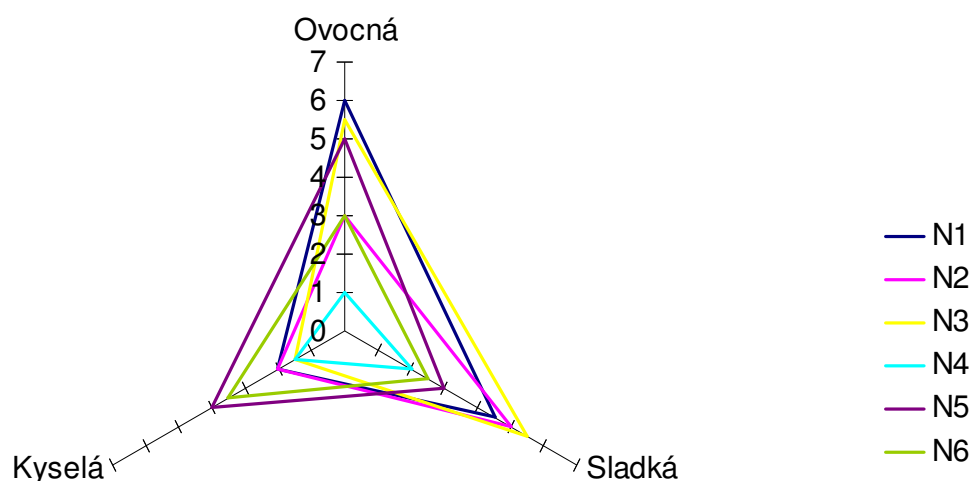
Obr. 43 Srovnání intenzity a celkové přijatelnosti vůně a chuti vzorků nápojů. Použitá stupnice pro intenzitu vůně a chuti: 1 neznatelná \Rightarrow 7 velmi silná. Použitá stupnice pro příjemnost vůně a chuti: 1 vynikající \Rightarrow 7 nepřijatelná. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 11.

Výsledky profilového testu

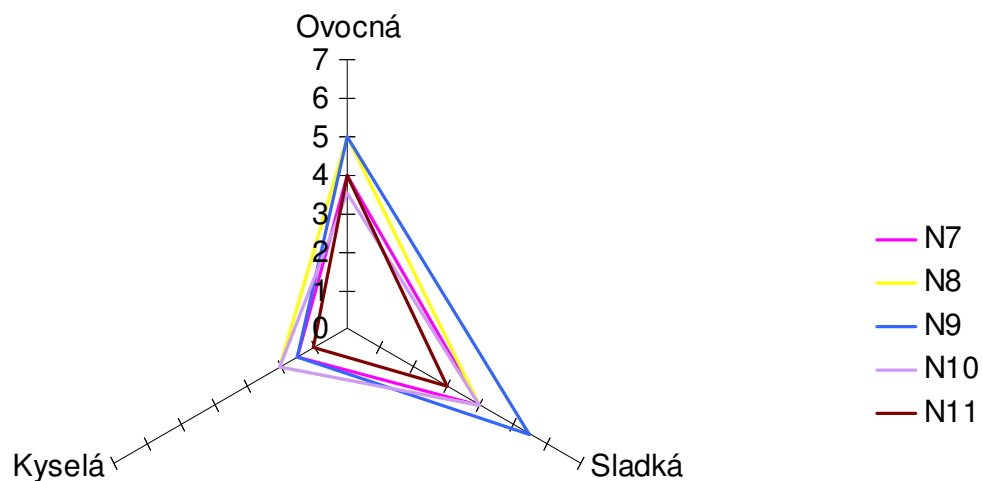
Pro podrobnější popis vůně a chuti vzorků byl proveden také profilový test. V tomto testu hodnotitelé posuzovali, jakou intenzitou přispívá vybraný deskriptor (ovocná, sladká, kyselá) k celkovému vjemu vůně popř. chuti jednotlivých ovocných nápojů. Vizualizace sensorických profilů jednotlivých vzorků jsou znázorněny na **Obrázku 44-47**. Pro lepší názornost grafického vyjádření byly vzorky rozděleny na 2 skupiny.

Rozdíly mezi vzorky byly výrazné ($P < 0,05$). U většiny vzorků k celkovému flavouru nejvíce přispívala chuť a vůně ovocná, v některých případech sladká. Profily vůní alkoholických nápojů jsou zobrazeny na **Obrázku 44**. Nejvíce ovocnou vůni z této skupiny nápojů měl podle hodnotitelů vzorek N1 a N3, nejvíce sladký se jevil hodnotitelům vzorek N3. U vzorků N5 a N6 k celkové vůni přispívala také vůně kyselá. Profily vůní ovocných nealkoholických nápojů jsou zobrazeny na **Obrázku 45**. Ovocná a sladká vůně dosahovaly střední až silnější intenzity, kyselá vůně byla u nealkoholických nápojů hodnocena jako velmi slabá až nezatelná.

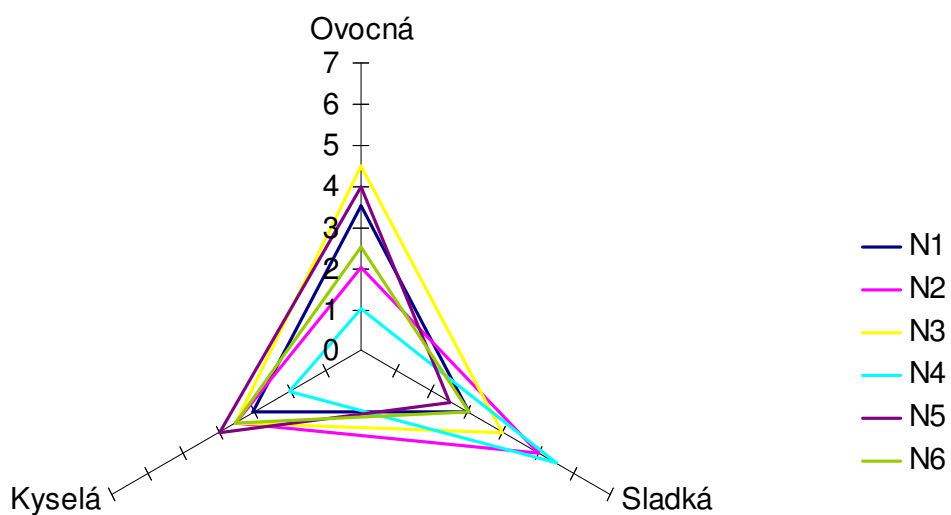
Podle profilů chutí dosahovala podle hodnotitelů silnější intenzity z hlediska ovocné a sladké chuti skupina nealkoholických nápojů. Naopak tato skupina nápojů dosahovala velmi slabé intenzity v kyselé chuti (**Obrázek 47**). Ze skupiny alkoholických nápojů se nejvíce ovocný jevil vzorek N3, nejvíce sladký N4. Kyselá chuť u alkoholických nápojů byla o něco vnímavější, byla označena jako slabá až střední (**Obrázek 46**).



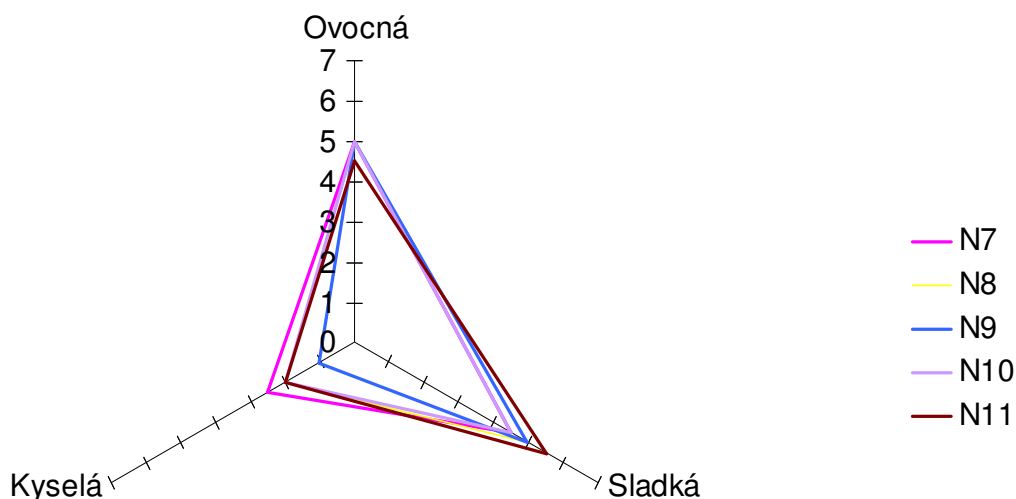
Obr. 44 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky nápojů N1-N6. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 11.



Obr. 45 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů vůní pro vzorky nápojů N7-N11. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 11.



Obr. 46 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chutí pro vzorky nápojů N1-N6. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 11.



Obr. 47 Profilový test znázorňující zastoupení vybraných deskriptorů chutí pro vzorky nápojů N7-N11. Výsledky jsou prezentovány jako medián (počet hodnotitelů $n=16$). Kódy vzorků viz Tabulka 11.

V *Tabulkách 111, 112* jsou přehledně shrnuty výrazy, které jednotliví hodnotitelé uváděli pro popis příjemné charakteristické, příp. nepříjemné chuti a/nebo vůně.

Ze vzorků alkoholických nápojů N1 obsahoval hruškový koncentrát, který hodnotitelé správně rozpoznali, někteří však uváděli jablko. Vzorek N2 byl popisován jako „tutti frutti“. U vzorku N3 hodnotitelé většinou správně rozpoznali višně. U vzorku N4 hodnotitelé nebyli schopni popsat charakteristický vjem, detekovali pouze off-flavour, který popisovali jako hořký, umělý apod. U vzorku N5 hodnotitelé cítili třešeň, višně nebo rybíz. U vzorku N6 hodnotitelé většinou správně rozpoznali jablko a citron, někteří uváděli nesprávně hrozen. Zároveň zde uváděli mírně trpkou, hořkou, nakvašenou chuť a/nebo vůni.

Ze vzorků nealkoholických nápojů u N7 hodnotitelé většinou správně rozpoznali jablko a broskev, někteří uváděli nesprávně hrozen. Vzorek N8 obsahoval jahodovou šťávu a černý rybíz, hodnotitelé však uváděli jablko nebo citrus. U vzorku N9 hodnotitelé cítili jahodu nebo malinu. U vzorku N10 hodnotitelé většinou správně rozpoznali pomeranč, někteří zde však uváděli slabý off-flavour, který popisovali jako „jar“. Vzorek N11 popisovali jako citrus nebo citron.

Z výsledků je patrné, že při charakterizaci flavouru alkoholických i nealkoholických nápojů byli hodnotitelé poměrně velmi úspěšní. Podle předběžného průzkumu vysoké procento hodnotitelů (93,75 %) má ovocné aromatizované nápoje velmi rádo, vzhledem k jejich časté konzumaci jsou patrně schopni dobře popsat vnímanou chuť a vůni.

Tabulka 111 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná“ vůně, tj. vůně, která podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 11.

Profilový test vůní		N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	N8	N9	N10	N11
Charakteristická	hruška	4										
	jablko	3					3	2	2			
	třešeň/višeň			8		3						
	hrozen						4					
	citrón						2					
	rybíz					2						
	tutti frutti		2									
	broskev							4				
	pomeranč										8	
	jahoda									4		
	malina									4		
citrus								2			2	
Jiná, nepříjemná	žvýkačka	1										
	nakvašené					1	1					
	alpa				1							
	okena				2			1				
	líh				2							
	energet. nápoj		1									
	gumová		1									
	hořká				1							
	alkohol				1	1						
	čistič/jar										2	

Tabulka 112 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná“ chuť, tj. chuť, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 11.

Profilový test chuti		N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	N8	N9	N10	N11
Charakteristická	hruška	4										
	jablko	3					3		3			
	višeň			7		2						
	lesní plody			2								
	citrón						3					2
	hrozen						3	3				
	rybíz					4						
	broskev							4				
	pomeranč										8	
	jahoda									6		
	malina									2		
citrus								2				

Tabulka 112 Seznam výrazů pro deskriptory „charakteristická, jiná příjemná a jiná nepříjemná“ chuť, tj. chuť, které podle hodnotitelů charakterizuje daný vzorek. Kódy vzorků viz Tabulka 11 - pokračování

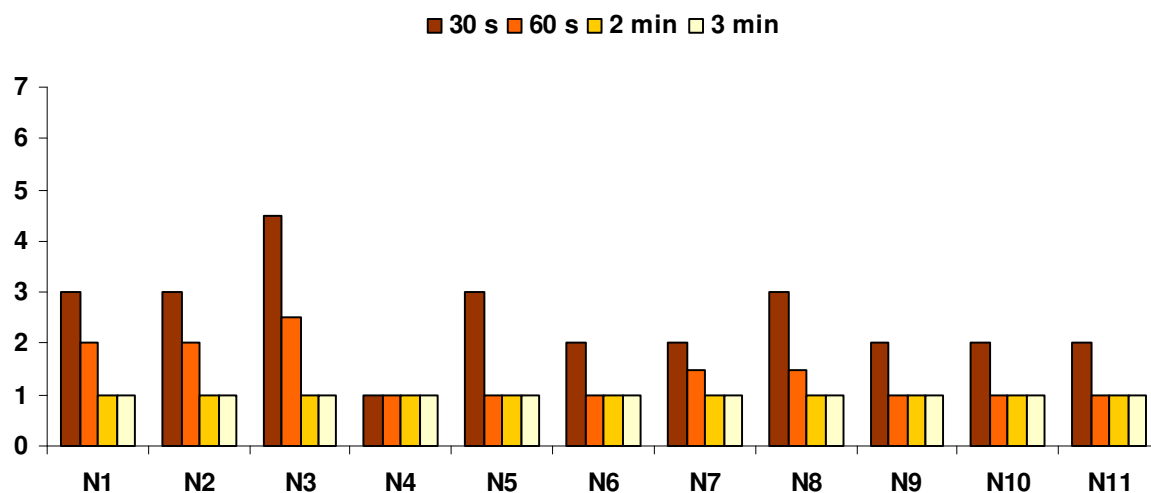
Jiná, nepříjemná	žvýkačka	1										
	trpká		1	1			1		1	1		1
	hořká					1	1					
	umělá				1							
	líh				1							
	okena				1							
	alkohol	2		1								
	čistič/jar										1	

Časové doznívání chuti

U vzorků alkoholických a nealkoholických nápojů bylo také hodnoceno časové doznívání chuti. Hodnotitelé hodnotili intenzitu příjemné charakteristické a také příp. nepříjemné chuti v určených časových intervalech po dobu 3 minut po polknutí.

Jak je patrné z **Obrázku 48**, časové doznívání příjemné chuti mělo podle předpokladu klesající tendenci. Prakticky u všech vzorků byla dobře vnímatelná pouze cca 30 s, již po 60 s byla její intenzita velmi slabá, v některých případech neznatelná.

Nepříjemná chuť slabé intenzity byla detekována pouze u vzorku alkoholického nápoje N4 (hořká, umělá - viz výše), přetrvávala však pouze asi 60 s. U ostatních vzorků byla intenzita nepříjemné chuti po vymezenou dobu hodnocena jako velmi nízká (neznatelná).



Obr. 48 Časové doznívání intenzity charakteristické (příjemné) chuti vzorků nápojů. Kódy vzorků viz Tabulka 11.

5.7 Vliv alergenních vonných látek na senzorické vlastnosti produktů

Studované alergenní vonné látky mají své specifické senzorické vlastnosti, které přispívají k celkovému flavouru daného výrobku. Sensorický vjem nevytváří obvykle pouze jedna látka, vždy jde o směsi aromatických látek. Právě sensorická analýza byla vybrána pro určení vlivu stanovených alergenních vonných látek na senzorické vlastnosti analyzovaných výrobků. Kosmetické výrobky byly hodnoceny pouze z hlediska vůně, u zubních past a potravin byla posuzována vůně i chuť. Velké množství sledovaných látek bylo nalezeno právě v kosmetických výrobcích, i když některé z nich nemají specifikovanou vůni (pleťové vody, krémy aj.). Jejich vůně byla většinou popisována jako ovocná a květinová. Vzhledem k tomu, že se většina studovaných látek nachází v přírodních materiálech, vysoké zastoupení měly také v čajových směsích. Mohou být součástí rostlinného materiálu nebo také mohou být čajové lístky aromatizovány přímo silicemi, které se do nich vpravují prostou difúzí ve formě par. U ostatních vzorků potravin převládala ovocná vůně a chuť.

Téměř ve všech vzorcích byly identifikovány limonen a linalool. Linalool má výraznou květinovou vůni připomínající konvalinky. Vyskytuje se tedy v široké škále kosmetických výrobků, přidává se do květinových kompozic. Nachází se také v jablečné, mandarinkové a pomerančové šťávě, v meruňkách, v broskvích, v jahodách, ve švestkách, v gardéniích, v levandulích, v mrkvi, v bergamotovém oleji, v majoránce, v tymiánu, v kardamonu, v koriandru, v brusinkách aj. Limonen má svěží citrusovou vůni. Vyskytuje se v grapefruitech, v citronech, v limetkách, v pomerančích, v pepři aj. Obě vonné látky se široce využívají v různých oblastech průmyslu, ve výrobcích, které mají svěží aroma. Typickou citrónovou vůni má citral, ale nahořklou chuť. Je přítomen v mnoha rostlinách, používá se do kolínských vod, kosmetických přípravků, citrusových vůní a čajových směsí [6, 158, 171].

Nasládlou vůni květů s jemným odstínem citrusů má citronello. Také je přítomen v mnoha rostlinách, v čajových směsích a mnoha druzích ovoce. Používá se k ochucování nápojů, do aromat a parfémových kompozic typu růže, geránie. Vůni růže poskytuje také geraniol. Je přítomen v rostlinách (růže, levandule, jasmín aj.), v kosmetických přípravcích. Používá se do květinových kompozic (nejčastěji do typů jako růže, geránie, jasmín, neroli, lípa, ylang-ylang) a do aromat jako ananas, jablko, broskev nebo meruňka [6, 158, 171, 176].

Téměř ve všech přípravcích určených k ústní hygieně byly nalezeny také cinnamal, eugenol a isoeugenol. Všechny tyto vonné látky se používají v dentálních materiálech ke korekci vůně, ke zlepšení nebo zvýraznění chuti. Kromě toho se cinnamaldehyd, který chutná a voní skořicí, široce využívá v potravinářství. Nejvíce se používá do aromat, je přítomen v mnoha kořenících směsích a žvýkačkách, kde byl také stanoven. K výrobě kořenitých aromat se také využívá eugenol, který voní hřebíčkem a karafiátem. V přírodě je obsažen v četných silicích, což vysvětluje fakt, že byl nalezen téměř ve všech čajových směsích (sypaných i porcovaných) stejně jako isoeugenol. Také se nachází v kořenících směsích, vyskytuje se v mnoha rostlinách a využívá se v aromatizovaných čajích [158, 171].

V ovocných aromatizovaných čajích, cukrovinkách a nápojích se také hojně vyskytuje amylcinnamylalkohol, který byl nalezen téměř ve všech analyzovaných vzorcích potravin. Tato látka patří mezi ovocné příchutě používané v potravinářství a ve velké míře také jako vůně v kosmetických prostředcích. Má příjemnou vůni broskví, banánů a hrušek. Stejně využití má také amylcinnamal, který byl nalezen ve všech analyzovaných nápojích, žvýkačkách a bonbónech. V potravinářství se využívá ke zlepšení nebo zvýraznění chuti. Vyskytuje se v mnoha silicích květů a má jasmínovou vůni. Používá se do květinových kompozic a do kosmetických přípravků. Jemnější jasmínovou vůni než amylcinnamal má

hexylcinnamal, který se používá do květinových kompozic, do kosmetiky, čisticích prostředků a také do aromat [158, 171, 177].

Cinnamylalkohol byl také nalezen v mnoha analyzovaných výrobcích, má příjemnou květinovou až skořicovou vůni a hořkou chuť. Používá se v kosmetických výrobcích běžného denního použití a také do aromat [171].

K látkám, které se vyznačují květinovou vůni, se také řadí methyl 2-oktynoát a α -isomethyl ionon, které se využívají v kosmetických přípravcích, ale také do ovocných aromat. Byly nalezeny v některých druzích čajů, bonbónů a nápojů. Větší zastoupení v kosmetických výrobcích měl hydroxycitronellal, který má konvalinkovou až liliovou vůni. Používá se především v kosmetice denního použití a do čisticích prostředků, přidává se do mnoha květinových kompozic a do některých aromat (např. lípa, med). Lilial a lyral se vyznačují sladkou květinovou vůní. Obě vonné látky se nejčastěji používají v kosmetice (detergenty, šampony, výrobky ke korekci zápachu), kde byl také většinou stanoveny [158, 171, 178].

Farnesol má sladkou květinovou vůni. Používá se do různých kosmetických přípravků a do aromat typu banán, broskev, meruňka, malina, rybíz apod. Vyskytuje se v květech pomerančovníku, růže, jasmínu, konvalinek nebo lípy. Byl nalezen v kosmetických přípravcích, v některých druzích čajových směsí a nápojích. Další zástupce květinové vůně je anisalkohol. Přidává se do aromat typu broskev, fíky, kakao, vanilka aj. Je součástí vůní anýzu, květů jabloní, meruněk, banánu, karafiátu, černého rybízu, třešní, hroznů a řady dalších [158, 171, 179].

Látky, které se využívají jako rozpouštědlo pro vonné látky v kosmetice, jsou benzylalkohol, benzylbenzoát a benzylsalicylát. Benzylalkohol se přidává do květinových kompozic, do aromat peckovitého ovoce. Používá se do kosmetických přípravků jako konzervační látka, v potravinářství jako aditivum v ovocných trestích, nápojích, bonbonech aj. Benzylbenzoát se také využívá do parfémových kompozic a do aromat pro hořkosladkou chuť. Používá se jako potravinářské aditivum pro stabilizaci umělých příchutí. Obě látky byly nalezeny téměř ve všech analyzovaných vzorcích. Benzylsalicylát se využívá jako fixativum vonných látek v kosmetice, je přidáván do aromat např. rybízových. Vyznačuje se slabou balzamickou vůni a ovocnou chutí [158, 171, 180].

Kumarin je velmi používanou aromatickou látkou a byl ve většině vzorků stanoven. Kumarin je přítomen v mnoha rostlinách, používá se v kosmetice, v aromatických nápojích, v potravinářství. Svou vůní připomíná tonkové boby, seno a vzdáleně vanilku [171].

Benzylcinnamát má jemnou balzamickou vůni. Používá se do sladkých těžkých aromat, ale spíše v kosmetice. Byl nalezen pouze v kolínských vodách [158].

6 ZÁVĚR

Vonné látky mají velmi široké použití jak v kosmetickém průmyslu, tak v průmyslu potravinářském. V současné době se v dostupném sortimentu produktů vyskytuje široká škála výrobků, které jsou parfémovány (kosmetické přípravky, některé dětské hračky) nebo aromatizován (nápoje, cukrovinky). Stovky až tisíce vonných látek jsou průmyslově využívány, avšak kromě příjemných sensorických vlastností mohou některé z nich vyvolat nežádoucí reakce zvláště u citlivých jedinců. Negativní reakce na vonné substance mohou mít různou podobu, zahrnující kožní vyrážky, ekzémy, pálení očí, nevolnost, bolesti hlavy, kašel, neobvyklou chuť v ústech, dýchací obtíže. Z tisíců různých vonných složek, které se používají, je známo nejméně 100 jako kontaktní alergen a počet osob citlivých na tyto látky v posledních letech výrazně stoupá. Z důvodu možných nežádoucích účinků vonných látek bylo určeno 26 nejvýznamnějších potenciálních vonných alergenů a podle EU nařízení o kosmetických přípravcích (ES/1223/2009) byl jejich obsah limitován. Přítomnost vybraných vonných alergenních látek musí být označena v seznamu ingrediencí na obalu produktu, pokud jejich koncentrace přesáhne stanovenou mez 10 mg.kg^{-1} v *leave-on* a 100 mg.kg^{-1} v *rinse-off* produktech. Zatímco koncentrace alergenních vonných látek v kosmetických přípravcích, detergentech a hračkách jsou legislativně ošetřeny, legislativní omezení pro tyto látky přidávané do potravin ve formě aditiv neexistuje. Přítomnost vonných látek je na obale produktu označena pouze názvem „aroma“, popř. názvem použitého rostlinného materiálu, koncentrátů nebo extraktů.

Vzhledem k tomu, že chuť a vůně jsou pro spotřebitele klíčovými faktory při výběru produktu, je důležité vyvinout metodu k detekci a stanovení alergenních vonných látek jak v kosmetických přípravcích, tak v potravinách.

Hlavním cílem předložené disertační práce bylo vyvinout analytickou metodu vhodnou pro stanovení 24 legislativně omezených alergenních vonných látek v potravinách a předmětech běžného užívání (v kosmetických přípravcích a hračkách). Vybraná metoda byla optimalizována, validována a nakonec aplikována na široké spektrum reálných vzorků. Stanovené koncentrace byly v případě kosmetických vzorků a hraček porovnány s legislativou a údaji na etiketě, v případě potravin byla stanovená množství vztažena na legislativně určenou koncentrační mez *leave-on* produktů (10 mg.kg^{-1}).

Byla publikována řada studií, které aplikují různé extrakční metody ve spojení s vhodnou instrumentální technikou ke stanovení aromatických těkavých látek. Na základě literární rešerše v kap. 2.9 a 2.10 byla k izolaci alergenních vonných látek vybrána metoda mikroextrakce tuhým fází, která umožňuje extrakci těchto látek z headspace prostoru nad pevným nebo kapalným vzorkem, nevyžaduje organická rozpouštědla a je nenáročná na objem vzorku. Extrahované analyty byly stanoveny metodou plynové chromatografie s FID detekcí, která je nejčastěji využívanou technikou pro stanovení těkavých látek. Výběr chromatografické techniky také závisel na rozšířené dostupnosti této metody v mnoha laboratořích pro rutinní analýzy a její efektivní použití na těkavé látky.

Vývoj metody nejprve spočíval v identifikaci retenčních časů jednotlivých alergenních vonných látek pomocí vnějších standardů. Všechny studované látky byly úspěšně identifikovány, některé sledované látky byly směsí cis/trans izomerů (isoeugenol, citral, farnesol, lylal).

Jelikož byly analyty extrahovány v headspace prostoru, jedním z důležitých faktorů v headspace analýze je výběr SPME vlákna s vhodnou adsorpční vrstvou ke stanovovaným látkám. Byla srovnána extrakční účinnost pěti komerčně dostupných SPME vláken: PA 85 μm ; PDMS 100 μm ; PDMS/DVB 65 μm , CARTM/PDMS 85 μm ; DVB/CAR/PDMS 50/30 μm . Bylo vybráno vlákno CAR/PDMS, které vykázalo nejvyšší extrakční účinnost pro všechny studované alergenní vonné látky.

Pro dosažení spolehlivých výsledků byly optimalizovány následující parametry: doba dosažení rovnováhy, doba extrakce, teplota extrakce a doba desorpce. Optimalizace byla vyšetřována univariační a multivariační analýzou dat. Pomocí jednorozměrné analýzy byl zjištěn rozsah variability (maximální a minimální hodnoty) extrakčních parametrů, které byly následně využity v multivariační optimalizaci metody. Na základě statistického vyhodnocení (regresní analýza a analýza rozptylu) bylo zjištěno, že extrakční doba a teplota jsou významnými faktory pro HS-SPME extrakci alergenních vonných látek a analýzou responzní plochy byly vypočteny jejich optimální hodnoty (16,8 min a 39,9 °C), které byly následně ověřeny experimentálně. Na základě experimentálního a statistického stanovení optimálních hodnot extrakčních parametrů byly jako konečné extrakční podmínky zvoleny: doba dosažení rovnováhy 15 min, doba extrakce 17 min, teplota extrakce 40 °C, doba desorpce 10 min.

Optimalizovaná metoda byla validována stanovením linearity, opakovatelnosti, reprodukovatelnosti, mezí detekce, mezí stanovitelnosti a výtěžnosti.

Linearita byla testována v širokém rozsahu koncentrací a dosáhla vyhovující hodnoty koeficientů determinace pro všechny studované látky. Metoda byla lineární v celém požadovaném rozsahu koncentrací, koeficienty determinace se pohybovaly v rozmezí 0,9963-0,9998. Opakovatelnost a reprodukovatelnost byly stanoveny jako dobré, relativní směrodatné odchylky se pohybovaly pod 10 %. Meze detekce se pohybovaly v rozmezí 0,007-2,7 $\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$ a meze kvantifikace v rozmezí 0,023-8,9 $\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$. Vzhledem k nedostatku referenčních materiálů alergenních látek byla použitelnost metody na reálné vzorky ověřena pomocí výtěžnosti na základě standardního přídávku. Výsledné hodnoty výtěžnosti dosahovaly nad 80 % pro všechny sledované látky a prokázaly spolehlivost optimalizovaného postupu.

Optimalizovaná a validovaná metoda byla aplikována na analýzu náhodně vybraných reálných vzorků zahrnující kosmetické přípravky, avivážní přípravky, sypané aromatizované čaje, porcované a instantní čaje, žvýkácké gumy, želatinové bonbóny, ovocné alkoholické a nealkoholické nápoje.

Přítomnost alergenních vonných látek byla potvrzena ve všech analyzovaných vzorcích, čímž se prokázala všudepřítomnost cílových látek. Zastoupení i koncentrace analytů v jednotlivých vzorcích bylo velmi individuální, nicméně vonné alergeny limonen a linalool se objevily ve více než 90 % vzorků.

Bylo analyzováno 34 kosmetických přípravků typu *leave-on* a *rinse-off*, z toho 78 % kosmetických přípravků obsahovalo nejméně jeden alergen, který překročil legislativně stanovenou koncentrační hranici a nebyl uveden mezi ingrediencemi na etiketě výrobku. Průměrný počet alergenních vonných látek byl 12 na jeden kosmetický produkt.

Velké množství alergenních vonných látek bylo nalezeno v sypaných čajových směsích, kde průměrný počet nalezených alergenních látek činil 17 z 24 legislativně omezených. Koncentrace vonných alergenů v suché čajové směsi byly vyšší než koncentrace těchto látek ve výluhu, který spotřebitel konzumuje. Koncentrace látek byly velmi rozdílné, pohybovaly se od jednotek až ke stovkám $\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$, v některých případech i k tisícům $\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$. Nižší zastoupení alergenních vonných látek měly porcované čaje, kde bylo nalezeno v průměru 9

z 24 alergenních vonných látek. Koncentrace sledovaných látek ve výluhu byly v porovnání se sypanými čajovými směsmi nižší a pohybovaly se v desítkách $\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$. V případě želatinových bonbónů a žvýkacích gum bylo zastoupení vonných látek podobné, v každém vzorku bylo nalezeno v průměru 10 vonných alergenů s koncentracemi pohybujícími se v jednotkách až desítkách $\mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$. V případě alkoholických a nealkoholických nápojů bylo nalezeno v průměru 14 vonných alergenů na výrobek, jejich koncentrace se pohybovaly v jednotkách až desítkách $\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$, výjimečně ve stovkách až tisících. Z důvodu absence legislativního omezení těchto látek v potravinách byly stanovené koncentrace alergenních vonných látek ve všech vzorcích potravin porovnávány s legislativně určenou koncentrací v kosmetických produktech typu *leave-on*, $10\text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$. V každém vzorku potravin byly nalezeny v průměru 3 alergenní vonné látky, které přesáhly koncentraci $10\text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$.

Alergenní vonné látky jsou také přidávány do dětských hraček, aby zvýšily jejich atraktivnost nebo také z důvodu překrytí nepříjemných pachů ostatních materiálů. Metoda HS-SPME-GC-FID byla také aplikována na parfémované dětské hračky určené pro děti od 3, 5 a 6 let. Vonné alergeny v nich stanovené byly v souladu s vyhláškou č. 86/2011 Sb., nepřekročily koncentraci $100\text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$, a proto nemusely být uvedeny na obalu výrobku.

Všechny analyzované vzorky metodou HS-SPME-GC-FID byly také podrobeny sensorickému hodnocení flavouru. Pro hodnocení vzorků byl použit profilový test pro vybrané deskripty a sedmibodová kategorová ordinální stupnice, podle které byla hodnocena intenzita a příjemnost celkové vůně a chuti. Sledované alergenní látky mají do jisté míry určitou spojitost se sensorickými vlastnostmi výrobků, protože některé vůně a chuti byly hodnotiteli správně rozpoznány. Na druhou stranu musí být bráno v úvahu, že flavour nevytváří obvykle pouze jedna látka, ale téměř vždy jde o směs aromatických látek.

Výsledky této práce prokázaly, že alergenní vonné látky byly přítomny ve všech analyzovaných produktech, v některých případech jejich koncentrace přesahují stanovenou koncentrační mez, kterou udává příslušná legislativa. Potvrzené a podezřelé negativní účinky těchto látek na zdraví mohou v budoucnu vést ke snížení těchto limitů a dokonce ke stanovení maximální povolené koncentrace pro mnohé z těchto látek. Pozitivním krokem je, že se již používá termín „*fragrance free*“ na obalech některých kosmetických produktů.

Spotřeba aromatických látek v potravinách stále roste, ale jejich použití často znamená, že skutečná přírodní surovina (např. ovoce) nebyla použita. Označení „přírodní aroma“ by se mělo používat pouze tehdy, pokud jsou skutečně použity přírodní suroviny. V dnešní době se používají stovky těchto látek a v jediném výrobku jich může být použito několik najednou. Také u potravin by bylo vhodné obsah alergenních vonných látek legislativně omezit popř. na ně upozornit, protože aromatické látky v potravinách patří do skupiny potravinářských přísad, které jsou nezbytnou součástí prakticky všech potravin, ať už čerstvě připravených nebo zpracovaných. Výrobci však využívají svého práva neuvádět složení těchto směsí a použité aromatické látky tají.

Na základě této práce lze učinit závěr, že extrakční metoda HS-SPME, využitá k izolaci alergenních vonných látek, prokázala své výhody a ve spojení s plynovou chromatografií s FID detekcí je komplexní efektivní technikou pro simultánní stanovení sledovaných látek a může být aplikována i na jiné matrice, než byly studovány.

Tato práce je prvním krokem, který otevírá perspektivu dalších studií o alergenních vonných látkách nejen v kosmetických přípravcích, ale také v potravinách. První výsledky této práce již byly publikovány v časopise *Acta Chromatographica*. Cílem další studie by mohl být monitoring 24 alergenních látek v kosmetických výrobcích *fragrance-free*, v dekorativní kosmetice, v nealkoholických nápojích s údajem „aroma“, v energetických nápojích aj.

7 SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ

- [1] ČERVENÝ, Libor. Syntetické vonné a chuťové látky. *Chemické listy*. Praha: Česká společnost chemická, 1999, roč. 93, č. 7, s. 412-420. ISSN 0009-2770.
- [2] SCHWAB, Wilfried, Rachel DAVIDOVICH-RIKANATI a Efraim LEWINSOHN. Biosynthesis of plant-derived flavor compounds. *The Plant Journal*. 2008, roč. 54, č. 4, s. 712-732. ISSN 0960-7412.
- [3] CHISVERT, Alberto a Amparo SALVADOR. Perfumes in Cosmetics. Analytical Methods.: Perfumes in Cosmetics. Regulatory Aspects and Analytical Methods for Fragrance Ingredients and other Related Chemicals in Cosmetics. SALVADOR, Amparo a Alberto CHISVERT. *Analysis of cosmetic products*. 1st ed. London: Elsevier, 2007, s. 243-256. ISBN 978-0-444-52260-3.
- [4] GROOT, Anton C. a Peter J. FROSCHE. Adverse reactions to fragrances. A clinical review. *Contact Dermatitis*. 1997, roč. 36, č. 2, s. 57-86. ISSN 0105-1873.
- [5] BAKKALI, F., S. AVERBECK, D. AVERBECK a M. IDAOMAR. Biological effects of essential oils – A review. *Food and Chemical Toxicology*. 2008, roč. 46, č. 2, s. 446-475. ISSN 0278-6915.
- [6] VONÁŠEK, František a Emilie TREPKOVÁ. *Chuť a aroma*. Praha: Maxdorf, c2002, 124 s. Tajemství dobré chuti. ISBN 80-858-0051-9.
- [7] VELÍŠEK, Jan. *Chemie potravin 2*. 2. upr. vyd. Tábor: OSSIS, 2002, 331 s. ISBN 80-866-5903-8.
- [8] TREPKOVÁ, Emilie a František VONÁŠEK. *Vůně a parfémy: tajemství přitažlivosti*. Praha: Maxdorf, 1997, 173 s. ISBN 80-858-0048-9.
- [9] MITSUI, Takeo. Cosmetics and fragrances. MITSUI, Takeo. *New cosmetic science*. New York: Elsevier Science, 1997, s. 99-120. ISBN 978-0-444-82654-1.
- [10] GOOSSENS, A a J.P. LEPOITTEVIN. Allergie de contact aux cosmétiques et aux composants de parfums: aspects cliniques, chimiques et diagnostiques nouveaux. *Revue française d'allergologie et d'immunologie clinique*. 2003, roč. 43, č. 5, s. 294-300. ISSN 0335-7457.
- [11] MACHOVCOVÁ, Alena. Skryté a neočekávané alergenů v kosmetických přípravcích. *Dermatologie pro praxi*. 2007, č. 1, s. 6-9. ISSN 1802-2960.
- [12] MOWAD, Christen. Allergens of New and Emerging Significance. *Dermatology nursing / Dermatology Nurses' Association*. 2006, roč. 18, č. 6, s. 545-548. ISSN 1060-3441.
- [13] WOLF, Ronni, Danny WOLF, Binnur TÜZÜN, Yalcin TÜZÜN. Contact dermatitis to cosmetics. *Clinics in dermatology*. 2001, roč. 19, č. 4, s. 502-512. ISSN 0738-081x.
- [14] PONS-GUIRAUD, Annik. Alergie a kosmetika. Edukační brožura. UCB Institut pro alergii, 2005.
- [15] STORRS, Frances. Allergen of the Year: Fragrance. *Dermatitis: contact, atopic, occupational, drug: official journal of the American Contact Dermatitis Society, North American Contact Dermatitis Group*. roč. 18, č. 1, s. 3-7. ISSN 1710-3568.
- [16] DASTYCHOVÁ, Eliška. Kontaktní alergenů jako příčina vzniku ekzému. *Dermatologie pro praxi*. 2008, roč. 2, č. 2, s. 68-73. ISSN 1802-2960.
- [17] MATHELIER-FUSADE, P. Allergie aux parfums: quels tests pour quels conseils? 2009, roč. 49, č. 4, s. 366-370. ISSN 1877-0320.

- [18] BRIDGES, Betty. Fragrance: emerging health and environmental concerns. *Flavour and Fragrance Journal*. 2002, roč. 17, č. 5, s. 361-371. ISSN 0882-5734.
- [19] KILLIG, Claudia a Thomas WERFEL. Contact reactions to food. *Current Allergy and Asthma Reports*. 2008, roč. 8, č. 3, s. 209-214. ISSN 1529-7322.
- [20] ORTIZ, Karel J. a James A. YIANNIAS. Contact dermatitis to cosmetics, fragrances, and botanicals. *Dermatologic Therapy*. 2004, roč. 17, č. 3, s. 264-271. ISSN 1396-0296.
- [21] AMADO, A. a S.E. JACOB. Contact Dermatitis to Foods. *Actas Dermo-Sifiliográficas*. 2007, roč. 98, č. 7, s. 452-458. ISSN 0001-7310.
- [22] Česká republika. Zákon o ochraně veřejného zdraví a o změně některých souvisejících zákonů. In: *Sbírka zákonů*. 14. července 2000, roč. 2000, č. 258, 074/2000.
- [23] SANCHEZ-PRADO, Lucia, J. Pablo LAMAS, Gerardo ALVAREZ-RIVERA, Marta LORES, Carmen GARCIA-JARES a Maria LLOMPART. Determination of suspected fragrance allergens in cosmetics by matrix solid-phase dispersion gas chromatography-mass spectrometry analysis. *Journal of Chromatography A*. 2011, roč. 1218, č. 31, s. 5055-5062. ISSN 0021-9673
- [24] Kubelová Jana (Aroma Praha a.s.): *Parfémové kompozice a současná diskuze kolem nich*. Kosmetologický seminář, České Budějovice, 4.-6. dubna 2005.
- [25] SALVITO, Daniel T., Matthias G. H. VEY a Ronald J. SENNA. Fragrance materials and their environmental impact. *Flavour and Fragrance Journal*. 2004, roč. 19, č. 2, s. 105-108. ISSN 0882-5734.
- [26] BICKERS, David R., Peter CALOW, Helmut A. GREIM, Jon M. HANIFIN, Adrienne E. ROGERS, Jean-Hilaire SAURAT, I GLENN SIPES, Robert L. SMITH a Hachiro TAGAMI. The safety assessment of fragrance materials. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*. 2003, roč. 37, č. 2, s. 218-273. ISSN 0273-2300.
- [27] CADBY, Peter A., William R. TROY, John D. MIDDLETON a Matthias G. H. VEY. Fragrances: are they safe?. *Flavour and Fragrance Journal*. 2002, roč. 17, č. 6, s. 472-477. ISSN 0882-5734.
- [28] Jirousová Jana: *Parfémové kompozice – limitující faktory při jejich tvorbě*. Kosmetologický seminář, České Budějovice, 11.-12. dubna 2006.
- [29] API, Anne Marie a Matthias VEY. Implementation of the dermal sensitization Quantitative Risk Assessment (QRA) for fragrance ingredients. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*. 2008, roč. 52, č. 1, s. 53-61. ISSN 0273-2300.
- [30] API, Anne Marie, David A. BASKETTER, Peter A. CADBY, Marie-France CANO, Graham ELLIS, G. Frank GERBERICK, Peter GRIEM, Pauline M. MCNAMEE, Cindy A. RYAN a Robert SAFFORD. Dermal sensitization quantitative risk assessment (QRA) for fragrance ingredients. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*. 2008, roč. 52, č. 1, s. 3-23. ISSN 0273-2300.
- [31] NOHYNEK, Gerhard J., Eric ANTIGNAC, Thomas RE a Herve TOUTAIN. Safety assessment of personal care products/cosmetics and their ingredients. *Toxicology and Applied Pharmacology*. 2010, roč. 243, č. 2, s. 239-259. ISSN 0041-008x.
- [32] ZELIGER, Harold. Cosmetics: Toxicity and Regulatory Requirements in the US. BETTON, C. *Global regulatory issues for the cosmetics industry*. Norwich, N.Y.: W. Andrew Pub., 2007, s. 63-70. ISBN 978-0-8155-1567-8.

- [33] KLASCHKA, Ursula. Risk management by labelling 26 fragrances?. *International Journal of Hygiene and Environmental Health*. 2010, roč. 213, č. 4, s. 308-320. ISSN 1438-4639.
- [34] CHAINTREAU, Alain. Perfumes in Cosmetics. Analytical Methods: Analytical Methods to Determine Potentially Allergenic Fragrance-Related Substances in Cosmetics. SALVADOR, Amparo, Alberto CHISVERT. *Analysis of cosmetic products*. 1st ed. London: Elsevier, 2007, s. 257-275. ISBN 978-0-444-52260-3.
- [35] PAUWELS, M., B. DEJAEGHER, Y. VANDER HEYDEN a V. ROGIERS. Critical analysis of the SCCNFP/SCCP safety assessment of cosmetic ingredients (2000-2006). *Food and Chemical Toxicology*. 2009, roč. 47, č. 4, s. 898-905. ISSN 0278-6915.
- [36] Evropská unie. Nařízení Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1223/2009 ze dne 30. listopadu 2009 o kosmetických přípravcích. In: *Úřední věstník Evropské unie*. 22. prosince 2009, L 342, Svazek 52. ISSN 1725-5074.
- [37] Česká republika. Nařízení vlády o technických požadavcích na hračky. In: *Sbírka zákonů*. Česká republika, 20. července 2011, roč. 2011, č. 86, 032.
- [38] LAKE, B.G, J.G EVANS, F. CHAPUIS, D.G WALTERS a R.J. PRICE. Studies on the disposition, metabolism and hepatotoxicity of coumarin in the rat and Syrian hamster. *Food and Chemical Toxicology*. 2002, vol. 40, issue 6, s. 809-823. ISSN 0278-6915.
- [39] LAKE, B.G. Coumarin Metabolism, Toxicity and Carcinogenicity: Relevance for Human Risk Assessment. *Food and Chemical Toxicology*. 1999, vol. 37, issue 4, s. 423-453. ISSN 0278-6915.
- [40] WANG, Yan-Hong, Bharathi AVULA, N. P. Dhammika NANAYAKKARA, Jianping ZHAO a Ikhlas A. KHAN. Cassia Cinnamon as a Source of Coumarin in Cinnamon-Flavored Food and Food Supplements in the United States. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2013-05-08, vol. 61, issue 18, s. 4470-4476. ISSN 0021-8561
- [41] Evropská unie. Nařízení Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1334/2008 ze dne 16. prosince 2008 o látkách určených k aromatizaci a některých složkách potravin vyznačujících se aromatem pro použití v potravinách nebo na jejich povrchu a o změně nařízení Rady (EHS) č. 1601/91, nařízení (ES) č. 2232/96 a č. 110/2008 a směrnice 2000/13/ES. In: *Úřední věstník Evropské unie*. 31.12.2008, L 354, Svazek 51. ISSN 1725-5074.
- [42] SIDES, Alasdair, Kevin ROBARDS a Stuart HELLIWELL. Developments in extraction techniques and their application to analysis of volatiles in foods. *Trends in analytical chemistry*. 2000, roč. 19, č. 5, s. 322-329. ISSN 0165-9936.
- [43] WILKES, Jon G., Eric D. CONTE, Yongkyoung KIM, Manuel HOLCOMB, John B. SUTHERLAND a Dwight W. MILLER. Sample preparation for the analysis of flavors and off-flavors in foods. *Journal of Chromatography A*. 2000, roč. 880, č. 1-2, s. 3-33. ISSN 0021-9673.
- [44] PILLONEL, L., J. O. BOSSET a R. TABACCHI. Rapid preconcentration and enrichment techniques for the analysis of food volatile. A review. *LWT – Food Science and Technology*. 2002, roč. 35, č. 1, s. 1-14. ISSN 0023-6438.
- [45] CHURÁČEK, Jaroslav. *Nové trendy v teorii a instrumentaci vybraných analytických metod*. 1. vyd. Praha: Academia, 1993, 387 s. ISBN 80-200-0010-0.

- [46] CHURÁČEK, Jaroslav. *Analytická separace látek*. 1. vyd. Praha: SNTL, 1990, 384 s. ISBN 80-030-0569-8.
- [47] BARTÁK, Petr, Petr BEDNÁŘ, Lubomír ČÁP, Lenka ONDRÁKOVÁ a Zdeněk STRÁNSKÝ. SPME - A valuable tool for investigation of flower scent. *Journal of Separation Science*. 2003, roč. 26, č. 8, s. 715-721. ISSN 1615-9306.
- [48] DA COSTA, Neil C. a Sanja ERI. Identification of Aroma Chemicals. ROWE, David J. *Chemistry and Technology of Flavors and Fragrances*. Oxford: Blackwell, 2005, s. 12-34. ISBN 1-4051-1450-9.
- [49] DAWIDOWICZ, Andrzej L. a Ewelina RADO. Matrix solid-phase dispersion (MSPD) in chromatographic analysis of essential oils in herbs. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 2010, roč. 52, č. 1, s. 79-85. ISSN 0731-7085.
- [50] BARKER, Steven A. Matrix solid phase dispersion (MSPD). *Journal of Biochemical and Biophysical Methods*. 2007, roč. 70, č. 2, s. 151-162. ISSN 0165-022x.
- [51] RIDGWAY, Kathy, Sam P.D. LALLJIE a Roger M. SMITH. Sample preparation techniques for the determination of trace residues and contaminants in foods. *Journal of Chromatography A*. 2007, roč. 1153, 1-2, s. 36-53. ISSN 0021-9673.
- [52] DAWIDOWICZ, Andrzej L., Natalia B. CZAPCZYNSKA a Dorota WIANOWSKA. The loss of essential oil components induced by the Purge Time in the Pressurized Liquid Extraction (PLE) procedure of *Cupressus sempervirens*. *Talanta*. 2012, roč. 94, s. 140-145. ISSN 0039-9140.
- [53] EIKANI, Mohammad H., Fereshteh GOLMOHAMMAD a Soosan ROWSHANZAMIR. Subcritical water extraction of essential oils from coriander seeds (*Coriandrum sativum* L.). *Journal of Food Engineering*. 2007, roč. 80, č. 2, s. 735-740. ISSN 0260-8774.
- [54] BAGHERIAN, Homa, Farzin ZOKAEE ASHTIANI, Amir FOULADITAJAR a Mahdy MOHTASHAMY. Comparisons between conventional, microwave- and ultrasound-assisted methods for extraction of pectin from grapefruit. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. 2011, roč. 50, 11-12, s. 1237-1243. ISSN 02552701.
- [55] PENA, Rosa, Julia BARCIELA, Carlos HERRERO a Sagrario GARCIAMARTIN. Comparison of ultrasound-assisted extraction and direct immersion solid-phase microextraction methods for the analysis of monoterpenoids in wine. *Talanta*. 2005-07-15, roč. 67, č. 1, s. 129-135. ISSN 0039-9140.
- [56] POURMORTAZAVI, Seied Mahdi a Seiedeh Somayyeh HAJIMIRSADEGHI. Supercritical fluid extraction in plant essential and volatile oil analysis. *Journal of Chromatography A*. 2007, roč. 1163, 1-2, s. 2-24. ISSN 0021-9673.
- [57] REVERCHON, Ernesto a Iolanda DE MARCO. Supercritical fluid extraction and fractionation of natural matter. *The Journal of Supercritical Fluids*. 2006, roč. 38, č. 2, s. 146-166. ISSN 0896-8446.
- [58] PLUTOWSKA, Beata a Waldemar WARDENCKI. Aromagrams - Aromatic profiles in the appreciation of food quality. *Food Chemistry*. 2007, roč. 101, č. 2, s. 845-872. ISSN 0308-8146.
- [59] PSILLAKIS, E. a N. KALOGERAKIS. Developments in single-drop microextraction. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2002, roč. 21, č. 1, s. 54-64. ISSN 01659936.

- [60] BICCHI, Carlo, Chiara CORDERO, Erica LIBERTO, Barbara SGORBINI a Patrizia RUBIOLO. Headspace sampling of the volatile fraction of vegetable matrices. *Journal of Chromatography A*. 2008, roč. 1184, 1-2, s. 220-233. ISSN 0021-9673.
- [61] DEMEESTERE, Kristof, Jo DEWULF, Bavo DE WITTE a Herman VAN LANGENHOVE. Sample preparation for the analysis of volatile organic compounds in air and water matrices. *Journal of Chromatography A*. 2007, roč. 1153, 1-2, s. 130-144. ISSN 0021-9673.
- [62] GANJALI, Mohammad Reza, Hamid Reza SOBHI, Hadi FARAHANI, Parviz NOROUZI, Rassoul DINARVAND a Amir KASHTIARAY. Solid drop based liquid-phase microextraction. *Journal of Chromatography A*. 2010, roč. 1217, č. 16, s. 2337-2341. ISSN 0021-9673.
- [63] ČÍŽKOVÁ, Andrea, Martin ADAM, Petra PAVLÍKOVÁ a Karel VENTURA. Analýza složek v bylinných nápojích s využitím metody mikroextrakce jednou kapkou. *Chemické listy*. 2011, roč. 105, č. 13, s. 13-15. ISSN 1213-7103.
- [64] WIELGOMAS, Bartosz a Wojciech CZARNOWSKI. Headspace single-drop microextraction and GC-ECD determination of chlorpyrifos-ethyl in rat liver. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2008, roč. 390, č. 7, s. 1933-1941. ISSN 1618-2642.
- [65] MARRIOTT, Philip J, Robert SHELLIE a Charles CORNWELL. Gas chromatographic technologies for the analysis of essential oils. *Journal of Chromatography A*. 2001, roč. 936, 1-2, s. 1-22. ISSN 0021-9673.
- [66] ŠTĚRBA, Karel, Pavel DOSTÁLEK a Marcel KARABÍN. Moderní postupy využívané při přípravě vzorků pro stanovení alkoholů, esterů a kyselin v pivu. *Chemické listy*. 2011, roč. 105, č. 8, s. 603-610. ISSN 1213-7103.
- [67] SNOW, Nicholas H. a Gregory C. SLACK. Head-space analysis in modern gas chromatography. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2002, roč. 21, 9-10, s. 608-617. ISSN 0165-9936.
- [68] ZABARAS, D. a S. G. WYLLIE. Quantitative analysis of terpenoids in the gas phase using headspace solid-phase microextraction (HS-SPME). *Flavour and Fragrance Journal*. 2001, roč. 16, č. 6, s. 411-416. ISSN 0882-5734.
- [69] KATAOKA, Hiroyuki, Heather L. LORD a Janusz PAWLISZYN. Applications of solid-phase microextraction in food analysis. *Journal of Chromatography A*. 2000, roč. 880, 1-2, s. 35-62. ISSN 0021-9673.
- [70] PAWLISZYN, Janusz, Barbara PAWLISZYN a Michael PAWLISZYN. Solid Phase Microextraction (SPME). *The Chemical Educator*. 1997, roč. 2, č. 4, s. 1-7. ISSN 1430-4171.
- [71] AUGUSTO, Fabio a Antonio LUIZ PIRES VALENTE. Applications of solid-phase microextraction to chemical analysis of live biological samples. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2002, roč. 21, 6-7, s. 428-438. ISSN 0165-9936.
- [72] MILLS, Graham A. a Valerie WALKER. Headspace solid-phase microextraction procedures for gas chromatographic analysis of biological fluids and materials. *Journal of Chromatography A*. 2000, roč. 902, č. 1, s. 267-287. ISSN 0021-9673.
- [73] WARDENCKI, Waldemar, Magdalena MICHULEC a Janusz CURYŁO. A review of theoretical and practical aspects of solid-phase microextraction in food analysis. *International Journal of Food Science and Technology*. 2004, roč. 39, č. 7, s. 703-717. ISSN 0950-5423.

- [74] PAWLISZYN, Janusz. *Solid Phase Microextraction: Theory and Practice*. New York: Wiley-VCH, 1997, 247 s. ISBN 04-711-9034-9.
- [75] KATAOKA, Hiroyuki, Heather LORD a Janusz PAWLISZYN. Applications of solid-phase microextraction in food analysis. *Journal of Chromatography A*. 2000, roč. 880, č. 1-2, s. 35-62. ISSN 0021-9673.
- [76] KASSEM, Mohamed Gabr. Stir bar sorptive extraction for central nervous system drugs from biological fluids. *Arabian Journal of Chemistry*. 2011, roč. 4, č. 1, s. 25-35. ISSN 1878-5352.
- [77] DUNN, Michael S., Natalie VULIC, Robert A. SHELLIE, Simon WHITEHEAD, Paul MORRISON a Philip J. MARRIOTT. Targeted multidimensional gas chromatography for the quantitative analysis of suspected allergens in fragrance products. *Journal of Chromatography A*. 2006, roč. 1130, č. 1, s. 122-129. ISSN 0021-9673.
- [78] MERFORT, Irmgard. Review of the analytical techniques for sesquiterpenes and sesquiterpene lactones. *Journal of Chromatography A*. 2002, roč. 967, č. 1, s. 115-130. ISSN 0021-9673.
- [79] MONDELLO, Luigi, Alessandro CASILLI, Peter Quinto TRANCHIDA, Giovanni DUGO a Paola DUGO. Comprehensive two-dimensional gas chromatography in combination with rapid scanning quadrupole mass spectrometry in perfume analysis. *Journal of Chromatography A*. 2005, roč. 1067, 1-2, s. 235-243. ISSN 0021-9673.
- [80] ČÁSLAVSKÝ, Josef. Pokroky v chromatografii a jejich využití při analýze vod. *Sborník konference Pitná voda 2010: 10. pokračování konferencí Pitná voda z údolních nádrží: 17.5 - 20.5.2010 v Táboře*. Editor Petr Dolejš, Nataša Kalousková. České Budějovice: W&ET Team, 2010, s. 205-210. ISBN 978-80-254-6854-8.
- [81] RUBIOLO, P., B. SGORBINI, E. LIBERTO, C. CORDERO a C. BICCHI. Essential oils and volatiles: sample preparation and analysis. A review. *Flavour and fragrance journal*. 2010, roč. 25, č. 5, s. 282-290. ISSN 0882-5734.
- [82] ARENA, E, N. GUARRERA, S. CAMPISI a C. NICOLOSI ASMUNDO. Comparison of odour active compounds detected by gas-chromatography-olfactometry between hand-squeezed juices from different orange varieties. *Food Chemistry*. 2006, roč. 98, č. 1, s. 59-63. ISSN 0308-8146.
- [83] HÖGNADÓTTIR, Áslaug a Russell L. ROUSEFF. Identification of aroma active compounds in orange essence oil using gas chromatography-olfactometry and gas chromatography-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. 2003, roč. 998, 1-2, s. 201-211. ISSN 0021-9673.
- [84] VILLA, C., R. GAMBARO, E. MARIANI a S. DORATO. High-performance liquid chromatographic method for the simultaneous determination of 24 fragrance allergens to study scented products. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 2007, roč. 44, č. 3, s. 755-762. ISSN 0731-7085.
- [85] WANG, L.-H. a H.-J. LIU. Determination of fragrance allergens in essential oils and evaluation of their in vitro permeation from essential oil formulations through cultured skin. *Journal of Analytical Chemistry*. 2012, roč. 67, č. 1, s. 64-71. ISSN 1061-9348.
- [86] FURLANETTO, Sandra, Serena ORLANDINI, Iacopo GIANNINI, Benedetta PASQUINI a Sergio PINZAUTI. Microemulsion electrokinetic chromatography: An application for the simultaneous determination of suspected fragrance allergens in rinse-off products. *Talanta*. 2010, roč. 83, č. 1, s. 72-77. ISSN 0039-9140.

- [87] SGORBINI, B., M.R. RUOSI, C. CORDERO, E. LIBERTO, P. RUBIOLO a C. BICCHI. Quantitative determination of some volatile suspected allergens in cosmetic creams spread on skin by direct contact sorptive tape extraction-gas chromatography-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. 2010, roč. 1217, č. 16, s. 2599-2605. ISSN 0021-9673.
- [88] LAMAS, J. Pablo, Lucia SANCHEZ-PRADO, Carmen GARCIA-JARES, Marta LORES a Maria LLOMPART. Development of a solid phase dispersion-pressurized liquid extraction method for the analysis of suspected fragrance allergens in leave-on cosmetics. *Journal of Chromatography A*. 2010, roč. 1217, č. 52, s. 8087-8094. ISSN 0021-9673.
- [89] LAMAS, J. Pablo, Lucia SANCHEZ-PRADO, Carmen GARCIA-JARES a Maria LLOMPART. Solid-phase microextraction gas chromatography-mass spectrometry determination of fragrance allergens in baby bathwater. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2009, roč. 394, č. 5, s. 1399-1411. ISSN 1618-2642.
- [90] BECERRIL, Elias, J. Pablo LAMAS, Lucia SANCHEZ-PRADO, Maria LLOMPART, Marta LORES a Carmen GARCIA-JARES. Analysis of regulated suspected allergens in waters. *Talanta*. 2010, roč. 83, č. 2, s. 464-474. ISSN 0039-9140.
- [91] BECERRIL-BRAVO, Elias, J. PABLO LAMAS, Lucia SANCHEZ-PRADO, Marta LORES, Carmen GARCIA-JARES, Blanca JIMENEZ a Maria LLOMPART. Ultrasound-assisted emulsification-microextraction of fragrance allergens in water. *Chemosphere*. 2010, roč. 81, č. 11, s. 1378-1385. ISSN 0045-6535.
- [92] DEBONNEVILLE, Christian a Alain CHAINTREAU. Quantitation of suspected allergens in fragrances. *Journal of Chromatography A*. 2004, roč. 1027, 1-2, s. 109-115. ISSN 0021-9673.
- [93] NIEDERER, M., R. BOLLHALDER a Ch. HOHL. Determination of fragrance allergens in cosmetics by size-exclusion chromatography followed by gas chromatography-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. 2006, roč. 1130, č. 1, s. 109-116. ISSN 0021-9673.
- [94] CORDERO, Chiara, Carlo BICCHI, Daniel JOULAIN a Patrizia RUBIOLO. Identification, quantitation and method validation for the analysis of suspected allergens in fragrances by comprehensive two-dimensional gas chromatography coupled with quadrupole mass spectrometry and with flame ionization detection. *Journal of Chromatography A*. 2007, roč. 1150, 1-2, s. 37-49. ISSN 0021-9673.
- [95] SHELLIE, Robert, Philip MARRIOTT a Alain CHAINTREAU. Quantitation of suspected allergens in fragrances (Part I): evaluation of comprehensive two-dimensional gas chromatography for quality control. *Flavour and Fragrance Journal*. 2004, roč. 19, č. 2, s. 91-98. ISSN 0882-5734.
- [96] RASTOGI, S. C., J. D. JOHANSEN, P. FROSCH, T. MENNE, M. BRUZE, J. P. LEPOITTEVIN, B. DREIER, K. E. ANDERSEN a I. R. WHITE. Deodorants on the European market: quantitative chemical analysis of 21 fragrances. *Contact Dermatitis*. 1998, roč. 38, č. 1, s. 29-35. ISSN 0105-1873.
- [97] RASTOGI, S. C., J. D. JOHANSEN, T. MENNÉ, P. FROSCH, M. BRUZE, K. E. ANDERSEN, J. P. LEPOITTEVIN, S. WAKELIN a I. R. WHITE. Contents of fragrance allergens in children's cosmetics and cosmetic-toys. *Contact Dermatitis*. 1999, roč. 41, č. 2, s. 84-88. ISSN 0105-1873.

- [98] CHAINTREAU, Alain, Daniel JOULAIN, Christophe MARIN, Claus-Oliver SCHMIDT a Matthias VEY. GC-MS Quantitation of Fragrance Compounds Suspected To Cause Skin Reactions. 1. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2003, roč. 51, č. 22, s. 6398-6403. ISSN 0021-8561.
- [99] LEIJS, Hans, Joost BROEKHANS, Leon VAN PELT a Cynthia MUSSINAN. Quantitative Analysis of the 26 Allergens for Cosmetic Labeling in Fragrance Raw Materials and Perfume Oils. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2005, roč. 53, č. 14, s. 5487-5491. ISSN 0021-8561.
- [100] BASSEREAU, Maud, Alain CHAINTREAU, Stéphanie DUPERREX, Daniel JOULAIN, Hans LEIJS, Gerd LOESING, Neil OWEN, Alan SHERLOCK, Christine SCHIPPA, Pierre-Jean THOREL a Matthias VEY. GC-MS Quantification of Suspected Volatile Allergens in Fragrances. 2. Data Treatment Strategies and Method Performances. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2007, roč. 55, č. 1, s. 25-31. ISSN 0021-8561.
- [101] MONDELLO, Luigi, Danilo SCIARRONE, Alessandro CASILLI, Peter Quinto TRANCHIDA, Paola DUGO a Giovanni DUGO. Fast gas chromatography-full scan quadrupole mass spectrometry for the determination of allergens in fragrances. *Journal of Separation Science*. 2007, roč. 30, č. 12, s. 1905-1911. ISSN 1615-9314.
- [102] ADAHCHOUR, Mohamed, Menno BRANDT, Hans-Ulrich BAIER, René J.J. VREULS, A. Max BATENBURG a Udo A. Th. BRINKMAN. Comprehensive two-dimensional gas chromatography coupled to a rapid-scanning quadrupole mass spectrometer: principles and applications. *Journal of Chromatography A*. 2005, roč. 1067, 1-2, s. 245-254. ISSN 0021-9673.
- [103] KUO, Su-Ching, Shien-Kai CHUANG, Ho-Yang LIN a Lai-Hao WANG. Study of the aerosol fragrances of eugenol derivatives in *Cananga odorata* using diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy and gas chromatography. *Analytica Chimica Acta*. 2009, roč. 653, č. 1, s. 91-96. ISSN 0003-2670.
- [104] HISERODT, Richard D., Dennis F.H. SWIJTER a Cynthia J. MUSSINAN. Identification of atranorin and related potential allergens in oakmoss absolute by high-performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry using negative ion atmospheric pressure chemical ionization. *Journal of Chromatography A*. 2000, roč. 888, 1-2, s. 103-111. ISSN 0021-9673.
- [105] MASUCK, Ines, Christoph HUTZLER a Andreas LUCH. Investigations on the emission of fragrance allergens from scented toys by means of headspace solid-phase microextraction gas chromatography-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. 2010, roč. 1217, č. 18, s. 3136-3143. ISSN 0021-9673.
- [106] MASUCK, I., C. HUTZLER, O. JANN a A. LUCH. Inhalation exposure of children to fragrances present in scented toys. *Indoor Air*. 2011, roč. 21, č. 6, s. 501-511. ISSN 0905-6947.
- [107] CHEN, Yong, Frédéric BEGNAUD, Alain CHAINTREAU a Janusz PAWLISZYN. Quantification of perfume compounds in shampoo using solid-phase microextraction. *Flavour and Fragrance Journal*. 2006, roč. 21, č. 5, s. 822-832. ISSN 0882-5734.
- [108] SANCHEZ-PRADO, Lucia, Maria LLOMPART, J. Pablo LAMAS, Carmen GARCIA-JARES a Marta LORES. Multicomponent analytical methodology to control phthalates, synthetic musks, fragrance allergens and preservatives in perfumes. *Talanta*. 2011, roč. 85, č. 1, s. 370-379. ISSN 0039-9140.

- [109] JIROVETZ, Leopold, Gerhard BUCHBAUER, Albena STOYANOVA, Anastasia BALINOVA, Zhang GUANGJIUN a Ma XIHAN. Solid phase microextraction/gas chromatographic and olfactory analysis of the scent and fixative properties of the essential oil of *Rosa damascena* L. from China. *Flavour and Fragrance Journal*. 2005, roč. 20, č. 1, s. 7-12. ISSN 0882-5734.
- [110] ÖZEL, M.Z., F. GÖGÜS a A.C. LEWIS. Comparison of direct thermal desorption with water distillation and superheated water extraction for the analysis of volatile components of *Rosa damascena* Mill. using GCxGC-TOF/MS. *Analytica Chimica Acta*. 2006, roč. 566, č. 2, s. 172-177. ISSN 0003-2670.
- [111] ORTIZ, Gustavo a María Teresa TENA. Headspace solid-phase microextraction gas chromatography-mass spectrometry method for the identification of cosmetic ingredients causing delamination of packagings. *Journal of Chromatography A*. 2006, roč. 1101, 1-2, s. 32-37. ISSN 0021-9673.
- [112] LAMAS, J. Pablo, Lucia SANCHEZ-PRADO, Marta LORES, Carmen GARCIA-JARES a Maria LLOMPART. Sorbent trapping solid-phase microextraction of fragrance allergens in indoor air. *Journal of Chromatography A*. 2010, roč. 1217, č. 33, s. 5307-5316. ISSN 0021-9673.
- [113] GOMES, Paula B., Vera G. MATA a Alírio E. RODRIGUES. Production of rose geranium oil using supercritical fluid extraction. *The Journal of Supercritical Fluids*. 2007, roč. 41, č. 1, s. 50-60. ISSN 0896-8446.
- [114] HÖGNADÓTTIR, Áslaug a Russell L. ROUSEFF. Identification of aroma active compounds in orange essence oil using gas chromatography-olfactometry and gas chromatography-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. 2003, roč. 998, 1-2, s. 201-211. ISSN 0021-9673.
- [115] WANG, Li-Fei, Joo-Yeon LEE, Jin-Oh CHUNG, Joo-Hyun BAIK, Sung SO a Seung-Kook PARK. Discrimination of teas with different degrees of fermentation by SPME-GC analysis of the characteristic volatile flavour compounds. *Food Chemistry*. 2008, roč. 109, č. 1, s. 196-206. ISSN 0308-8146.
- [116] KUMAZAWA, Kenji a Hideki MASUDA. Identification of Potent Odorants in Japanese Green Tea (Sen-cha). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 1999, roč. 47, č. 12, s. 5169-5172. ISSN 0021-8561.
- [117] PRIPDEEVECH, Patcharee a Theeraphan MACHAN. Fingerprint of volatile flavour constituents and antioxidant activities of teas from Thailand. *Food Chemistry*. 2011, roč. 125, č. 2, s. 797-802. ISSN 0308-8146.
- [118] LV, Hai-Peng, Qiu-Sheng ZHONG, Zhi LIN, Li WANG, Jun-Feng TAN a Li GUO. Aroma characterisation of Pu-erh tea using headspace-solid phase microextraction combined with GC/MS and GC-olfactometry. *Food Chemistry*. 2012, roč. 130, č. 4, s. 1074-1081. ISSN 0308-8146.
- [119] PELLATI, Federica, Stefania BENVENUTI, Fumihiko YOSHIZAKI, Davide BERTELLI a Maria Cecilia ROSSI. Headspace solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry analysis of the volatile compounds of *Evodia* species fruits. *Journal of Chromatography A*. 2005, roč. 1087, 1-2, s. 265-273. ISSN 0021-9673.
- [120] TABANCA, Nurhayat, Betül DEMIRCI, Temel OZEK, Nese KIRIMER, K. Husnu Can BASER, Erdal BEDIR, Ikhlas A. KHAN a David E. WEDGE. Gas chromatographic-mass spectrometric analysis of essential oils from *Pimpinella* species

- gathered from Central and Northern Turkey. *Journal of Chromatography A*. 2006, roč. 1117, č. 2, s. 194-205. ISSN 0021-9673.
- [121] SPROLL, C., W. RUGE, C. ANDLAUER, R. GODELMANN a D. LACHENMEIER. HPLC analysis and safety assessment of coumarin in foods. *Food Chemistry*. 2008, roč. 109, č. 2, s. 462-469. ISSN 0308-8146.
- [122] RATERS, Marion a Reinhard MATISSEK. Analysis of coumarin in various foods using liquid chromatography with tandem mass spectrometric detection. *European Food Research and Technology*. 2008, roč. 227, č. 2, s. 637-642. ISSN 1438-2377.
- [123] CRUPI, M, R. COSTA, P. DUGO, G. DUGO a L. MONDELLO. A comprehensive study on the chemical composition and aromatic characteristics of lemon liquor. *Food Chemistry*. 2007, roč. 105, č. 2, s. 771-783. ISSN 0308-8146.
- [124] PINO, Jorge A. a Oscar QUERIS. Analysis of volatile compounds of mango wine. *Food Chemistry*. 2011, roč. 125, č. 4, s. 1141-1146. ISSN 0308-8146.
- [125] PEÑA-ALVAREZ, Araceli, Santiago CAPELLA, Rocío JUÁREZ a Carmen LABASTIDA. Determination of terpenes in tequila by solid phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. 2006, roč. 1134, 1-2, s. 291-297. ISSN 0021-9673.
- [126] BIANCHI, Giulia, Monica NUZZI, Alexa Avitabile LEVA a Anna RIZZOLO. Development of a headspace-solid phase micro extraction method to monitor changes in volatile profile of rose (*Rosa hybrida*, cv David Austin) petals during processing. *Journal of Chromatography A*. 2007, roč. 1150, 1-2, s. 190-197. ISSN 0021-9673.
- [127] JIROVETZ, Leopold, Gerhard BUCHBAUER, Martin Benoit NGASSOUM a Margit GEISSLER. Aroma compound analysis of *Piper nigrum* and *Piper guineense* essential oils from Cameroon using solid-phase microextraction-gas chromatography, solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry and olfactometry. *Journal of Chromatography A*. 2002, roč. 976, 1-2, s. 265-275. ISSN 0021-9673.
- [128] WONG, Sook Wai, Bin YU, Philip CURRAN a Weibiao ZHOU. Characterising the release of flavour compounds from chewing gum through HS-SPME analysis and mathematical modelling. *Food Chemistry*. 2009, roč. 114, č. 3, s. 852-858. ISSN 0308-8146.
- [129] DE JAGER, Lowri S., Gracia A. PERFETTI a Gregory W. DIACHENKO. Determination of coumarin, vanillin, and ethyl vanillin in vanilla extract products: liquid chromatography mass spectrometry method development and validation studies. *Journal of Chromatography A*. 2007, roč. 1145, 1-2, s. 83-88. ISSN 0021-9673.
- [130] DE JAGER, Lowri S., Gracia A. PERFETTI a Gregory W. DIACHENKO. Comparison of headspace-SPME-GC-MS and LC-MS for the detection and quantification of coumarin, vanillin, and ethyl vanillin in vanilla extract products. *Food Chemistry*. 2008, roč. 107, č. 4, s. 1701-1709. ISSN 0308-8146.
- [131] STANFILL, Stephen B. a David L. ASHLEY. Solid phase microextraction of alkenylbenzenes and other flavor-related compounds from tobacco for analysis by selected ion monitoring gas chromatography-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. 1999, roč. 858, č. 1, s. 79-89. ISSN 0021-9673.
- [132] LAWLESS, Harry T. a Hildegard HEYMANN. *Sensory evaluation of food: principles and practices*. [New ed.]. New York: Springer, 1999. ISBN 08-342-1752-X.

- [133] CARDELLO, A.V. a H.G. SCHUTZ. Sensory Science: Measuring Consumer Acceptance. In Hui, Y. H. *Handbook of Food Science, Technology and Engineering*. Vol. 2. New York: Taylor & Francis Group, 2006. ISBN 0-8493-9848-7.
- [134] SIDEL, J. L. a H. STONE. Sensory Science: Methodology. In Hui, Y. H. *Handbook of Food Science, Technology and Engineering*. Vol. 2. New York: Taylor & Francis Group, 2006. ISBN 0-8493-9848-7.
- [135] WILSON, Claire E. a Wendy E. BROWN. Influence of food matrix structure and oral breakdown during mastication on temporal perception of flavor. *Journal of Sensory Studies*. 1997, vol. 12, issue 1, s. 69-86. ISSN 0887-8250
- [136] SAINT-EVE, Anne, Nathalie MARTIN, Hervé GUILLEMIN, Etienne SÉMON, Elisabeth GUICHARD a Isabelle SOUCHON. Flavored Yogurt Complex Viscosity Influences Real-Time Aroma Release in the Mouth and Sensory Properties. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2006, vol. 54, issue 20, s. 7794-7803. ISSN 0021-8561
- [137] CHAMBERS, Edgar, Kadri KOPPEL, Hervé GUILLEMIN, Etienne SÉMON, Elisabeth GUICHARD a Isabelle SOUCHON. Associations of Volatile Compounds with Sensory Aroma and Flavor. *Molecules*. 2013, vol. 18, issue 5, s. 4887-4905. ISSN 1420-3049
- [138] PENSÉ-LHERITIER, Anne-Marie. Sensory analysis and cosmetics. *L'actualité chimique*. 2008, issue 323-324, s. 81-83. ISSN 0151-9093.
- [139] LEE, Jeehyun, Delores H. CHAMBERS, Hervé GUILLEMIN, Etienne SÉMON, Elisabeth GUICHARD a Isabelle SOUCHON. Flavors of green tea change little during storage. *Journal of Sensory Studies*. 2010, vol. 18, issue 5, s. 512-520. ISSN 0887-8250
- [140] LEE, Jeehyun, Delores H. CHAMBERS, Hervé GUILLEMIN, Etienne SÉMON, Elisabeth GUICHARD a Isabelle SOUCHON. Descriptive Analysis and U.S. Consumer Acceptability of 6 Green Tea Samples from China, Japan, and Korea. *Journal of Food Science*. 2010, vol. 75, issue 2, s. 141-147. ISSN 0022-1147
- [141] LEE, Jeehyun, Delores H. CHAMBERS, Hervé GUILLEMIN, Etienne SÉMON, Elisabeth GUICHARD a Isabelle SOUCHON. A lexicon for flavor descriptive analysis of green tea. *Journal of Sensory Studies*. 2007, vol. 22, issue 3, s. 141-147. ISSN 0887-8250
- [142] ALASALVAR, Cesarettin, Bahar TOPAL, Arda SERPEN, Banu BAHAR, Ebru PELVAN a Vural GÖKMEN. Flavor Characteristics of Seven Grades of Black Tea Produced in Turkey. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2012, vol. 60, issue 25, s. 6323-6332. ISSN 0021-8561
- [143] LEE, Soh Min, Seo-Jin CHUNG, Ok-Hee LEE, Hye-Seong LEE, Young-Kyoung KIM a Kwang-Ok KIM. Development of sample preparation, presentation procedure and sensory descriptive analysis of green tea. *Journal of Sensory Studies*. 2008, vol. 23, issue 4, s. 450-467. ISSN 0887-8250
- [144] OTT, Andreas, Alain HUGI, Marcel BAUMGARTNER, Alain CHAINTREAU, Young-Kyoung KIM a Kwang-Ok KIM. Sensory Investigation of Yogurt Flavor Perception: Mutual Influence of Volatiles and Acidity. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2000, vol. 48, issue 2, s. 441-450. ISSN 0021-8561
- [145] GONZALEZ, Nancy J., Koushik ADHIKARI a Martin F. SANCHO-MADRIZ. Sensory characteristics of peach-flavored yogurt drinks containing prebiotics and

- synbiotics. *LWT - Food Science and Technology*. 2011, vol. 44, issue 1, s. 158-163. ISSN 0023-6438.
- [146] LOURES, Milene Moreira Ribeiro, Valéria Paula Rodrigues MINIM, Elaine Berger CERESINO, Renata Carolina CARNEIRO a Luis Antonio MINIM. Ranking descriptive analysis in the sensory characterization of strawberry flavored diet yogurt enriched with whey protein concentrate. *Semina - Ciências Agrárias*. 2010, vol. 31, issue 3, s. 661-667. ISSN 1676-546X.
- [147] VÁCHOVÁ, Alena, Zdenka PANOVSÁ a D. LUKEŠOVÁ. The selection of the optimal rate of acid and sweet taste for lemon flavoured drops. *Czech Journal of Food Sciences*. 2009, vol. 27, s. 330-332. ISSN 1212-1800
- [148] TSACHAKI, Maroussa, Archontia P. ARNAOUTOPOULOU, Lila MARGOMENOU, Stylianos C. ROUBEDAKIS a Ioannis ZABETAKIS. Development of a suitable lexicon for sensory studies of the anise-flavoured spirits ouzo and tsipouro. *Flavour and Fragrance Journal*. 2010, vol. 25, issue 6, s. 468-474. ISSN 0882-5734
- [149] LEKSRIOMPONG, P.P., K. LOPETCHARAT, B. GUTHRIE, M.A. DRAKE a Ioannis ZABETAKIS. Descriptive analysis of carbonated regular and diet lemon-lime beverages. *Journal of Sensory Studies*. 2012, vol. 27, issue 4, s. 247-263. ISSN 0887-8250
- [150] KAPPES, S.M., S.J. SCHMIDT, S.-Y. LEE, M.A. DRAKE a Ioannis ZABETAKIS. Descriptive Analysis of Cola and Lemon/Lime Carbonated Beverages. *Journal of Food Science*. 2006, vol. 71, issue 8, s. 583-589. ISSN 0022-1147
- [151] OVEJERO-LÓPEZ, I., R. BRO, W.L.P. BREDIE, M.A. DRAKE a Ioannis ZABETAKIS. Univariate and multivariate modelling of flavour release in chewing gum using time-intensity: a comparison of data analytical methods. *Food Quality and Preference*. 2005, vol. 16, issue 4, s. 327-343. ISSN 0950-3293
- [152] TROCCAZ, Myriam, Olivier P. HAEFLIGER, Isabelle CAYEUX, Sabine BECCUCCI, Nicolas JECKELMANN, Jérôme BARRA, Anthony J. CLARK, Jacques SCHRENZEL a Pierre BAEHNI. Effects of Flavoured Mouth Rinses on Morning Breath Odour: a Sensory, Analytical and Microbial Evaluation. *Flavour and Fragrance Journal*. 2011, vol. 26, issue 2, s. 90-97. ISSN 0882-5734
- [153] HIGHTOWER, Carrita A., Edgar CHAMBERS IV, Isabelle CAYEUX, Sabine BECCUCCI, Nicolas JECKELMANN, Jérôme BARRA, Anthony J. CLARK, Jacques SCHRENZEL a Pierre BAEHNI. Descriptive sensory analysis of toothpaste flavor and texture using two sampling methods: brushing versus spoon tasting. *Journal of Sensory Studies*. 2009, vol. 24, issue 3, s. 301-316. ISSN 0887-8250
- [154] GONÇALVES, Gisele Mara Silva, Silvana Mariana SREBERNICH, Bartira Guiçardi VERCELINO, Bruna Melli ZAMPIERI, Nicolas JECKELMANN, Jérôme BARRA, Anthony J. CLARK, Jacques SCHRENZEL a Pierre BAEHNI. Influence of the presence and type of fragrance on the sensory perception of cosmetic formulations: brushing versus spoon tasting. *Brazilian Archives of Biology and Technology*. 2013, vol. 56, issue 2, s. 203-212. ISSN 1516-8913
- [155] MOKÁŇOVÁ, Radka. Analýza vonných látek v kosmetických prostředcích metodou plynové chromatografie. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2009. 92 s. Vedoucí diplomové práce Ing. Jana Zemanová, Ph.D.

- [156] SUCHÁNEK, Miloslav, Zbyněk PLZÁK, Pavel ŠUBRT a Ivan KORUNA. *Kvalimetrie. 7. Validace analytických metod*. Vyd. Praha: EURACHEM-ČR, 1997. 137 s. ISBN 80-901868-2-3.
- [157] Validační program pro statistické zpracování analytických dat. [cit. 16. 3. 2009]. Dostupné z: <<http://hplc.sweb.cz>>
- [158] VONÁŠEK, František, Ladislav NOVOTNÝ a Emilie TREPKOVÁ. *Látky vonné a chuťové*. 1. vyd. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1987, 437 s.
- [159] ZUBA Dariusz, Andrzej PARCZEWSKI a Manfred REICHENBÄCHER. Optimization of solid-phase microextraction conditions for gas chromatographic determination of ethanol and other volatile compounds in blood. *Journal of Chromatography B*. 2002, vol. 773, s. 75-82. ISSN 1570-0232.
- [160] MAZIDA, M.M., M.M. SALLEH a H. OSMAN. Analysis of volatile aroma compounds of fresh chilli (*Capsicum annum*) during stages of maturity using solid phase microextraction (SPME). *Journal of Food Composition and Analysis*. 2005, vol. 18, issue 5, s. 427-437. ISSN 0889-1575
- [161] STEFFEN, Alexandra a Janusz PAWLISZYN. Analysis of flavor volatiles using headspace solid-phase microextraction. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 1996, vol. 44, s. 2187-2193. ISSN 0021-8561
- [162] KING, Amanda J, James W. READMAN a John L. ZHOU. The application of solid-phase microextraction (SPME) to the analysis of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). *Environmental Geochemistry and Health*. 2003, vol. 25, s. 69-75. ISSN 1573-2983.
- [163] RIANAWATI, Elisabeth a Rajasekhar BALASUBRAMANIAN. Optimization and validation of solid phase micro-extraction (SPME) method for analysis of polycyclic aromatic hydrocarbons in rainwater and stormwater. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*. 2009, vol. 34, 13-16, s. 857-865.
- [164] DÍAZ, Paloma, Elena IBÁÑEZ, Guillermo REGLERO a Francisco J. SEÑORÁNS. Optimization of summer truffle aroma analysis by SPME: Comparison of extraction with different polarity fibres. *LWT - Food Science and Technology*. 2009, vol. 42, issue 7, s. 1253-1259. ISSN 0023-6438
- [165] MA, Q.L., N. HAMID, A.E.D. BEKHIT, J. ROBERTSON a T.F. LAW. Optimization of headspace solid phase microextraction (HS-SPME) for gas chromatography mass spectrometry (GC-MS) analysis of aroma compounds in cooked beef using response surface methodology. *Microchemical Journal*. 2013, vol. 111, s. 16-24.
- [166] MELOUN, Milan. *Kompendium statistického zpracování dat: metody a řešené úlohy*. Vyd. 2., přeprac. a rozš. Praha: Academia, 2006, 982 s. ISBN 80-200-1396-2.
- [167] ILZARBE, Laura, María Jesús ÁLVAREZ, Elisabeth VILES a Martín TANCO. Practical applications of design of experiments in the field of engineering: a bibliographical review. *Quality and Reliability Engineering International*. 2008, vol. 24, issue 4, s. 417-428. ISSN 1099-1638.
- [168] WOJTOWICZ, Petr. *Optimalizace teplotně programovatelného nástřiku velkého objemu vzorků v plynové chromatografii metodou plánovaného experimentu*. Olomouc, 2009. Diplomová práce. UP v Olomouci. Vedoucí práce doc. RNDr. Tomáš Adam, Ph.D.

- [169] ILZARBE, Laura, María Jesús ÁLVAREZ, Elisabeth VILES a Martín TANCO. Experimental design and optimisation (4): Plackett–Burman designs. *Analytical Methods*. 2013, vol. 5, issue 8, s. 1901-1903. ISSN 1759-9660.
- [170] DÖERFFEL, Klaus a Klaus EKSCHLAGER. *Optimální postup chemické analýzy*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1985.
- [171] KRATOCHVIL, František. Epikutánní testy. *Im-Bio-Pharm Consult*. [online]. 2007 [cit. 2013-10-13]. Dostupné z: www.epitesty.cz.
- [172] KOKTAVÝ, Pavel. Přehled hygienických a kosmetických přípravků pro děti. *Dermatologie pro praxi*. 2010, roč. 4, č. 4, s. 233-236. ISSN 1803-5337.
- [173] BASKETTER, David A., Annick PONS-GUIRAUD, Arian VAN ASTEN, Catherine LAVERDET, Jean-Paul MARTY, Ludovic MARTIN, Daniel BERTHOD, Sylvie SIEST, Françoise GIORDANO-LABADIE, Dominique TENNSTEDT, Marie BAECK, Martine VIGAN, Gérard LAINÉ, Christophe J. LE COZ, Marie-Claude JACOBS, Olivier BAYROU a Marie-Anne GERMAUX. Fragrance allergy: assessing the safety of washed fabrics. *Contact Dermatitis*. 2010, vol. 62, issue 6, s. 349-354.
- [174] BAREL, André O., Marc PAYE a Howard I. MAIBACH. *Handbook of Cosmetic Science and Technology*. New York: Taylor & Francis, 2001. 904 s. ISBN 0-8247-0292-1.
- [175] KOCH, I.S., M. MULLER, E. JOUBERT, M. VAN DER RIJST a T. NÆS. Sensory characterization of rooibos tea and the development of a rooibos sensory wheel and lexicon. *Food Research International*. 2012, vol. 46, issue 1, s. 217-228. ISSN 0963-9969.
- [176] LAPCZYNSKI, A., S.P. BHATIA, R.J. FOXENBERG, C.S. LETIZIA, a A.M. API. Fragrance material review on geraniol. *Food and Chemical Toxicology*. 2008, vol. 46, issue 11, S160-S170. ISSN 0278-6915.
- [177] BHATIA, S.P., G.A. WELLINGTON, J. COCCHIARA, J. LALKO, C.S. LETIZIA a A.M. API. Fragrance material review on alpha-amylcinnamyl alcohol. *Food and Chemical Toxicology*. 2007, vol. 45, issue 1, S32-S39. ISSN 0278-6915.
- [178] LAPCZYNSKI, A., J. LALKO, V.T. POLITANO, D. MCGINTY, S. BHATIA, C.S. LETIZIA a A.M. API. Fragrance material review on alpha-iso-methylionone. *Food and Chemical Toxicology*. 2007, vol. 45, issue 1, S280-S289. ISSN 0278-6915.
- [179] LAPCZYNSKI, A., S.P. BHATIA, C.S. LETIZIA a A.M. API. Fragrance material review on farnesol. *Food and Chemical Toxicology*. 2008, vol. 46, issue 11, S149-S156. ISSN 0278-6915.
- [180] LAPCZYNSKI, A., D. MCGINTY, L. JONES, S. BHATIA, C.S. LETIZIA a A.M. API. Fragrance material review on benzyl salicylate. *Food and Chemical Toxicology*. 2007, vol. 45, issue 1, S362-S380. ISSN 0278-6915.
- [181] KOLÁČKOVÁ, Adéla. *Analýza vybraných alergenů ve vonných kompozicích*. Brno, 2010. Diplomová práce. VUT v Brně. Vedoucí práce: Ing. Jana Zemanová, Ph.D.
- [182] BHATIA, S.P., G.A. WELLINGTON, J. COCCHIARA, J. LALKO, C.S. LETIZIA a A.M. API. Fragrance material review on benzyl cinnamate. *Food and Chemical Toxicology*. 2007, vol. 45, issue 1, S40-S48. ISSN 0278-6915.
- [183] HAGVALL, Lina, Carina BÄCKTORP, Sophie SVENSSON, Gunnar NYMAN, Anna BÖRJE a Ann-Therese KARLBERG. Fragrance Compound Geraniol Forms Contact Allergens on Air Exposure. Identification and Quantification of Oxidation Products

- and Effect on Skin Sensitization. *Chemical Research in Toxicology*. 2007, vol. 20, issue 5, s. 807-814. ISSN 1520-5010.
- [184] DO, T.-A. L., J. VIEIRA, J. M. HARGREAVES, B. WOLF, J. R. MITCHELL. Impact of Limonene on the Physical Properties of Reduced Fat Chocolate. *Journal of the American Oil Chemists' Society*. 2008, vol. 85, issue 10, s. 911-920. ISSN 1558-9331.
- [185] LETIZIA, C.S, J. COCCHIARA, J. LALKO a A.M. API. Fragrance material review on linalool. *Food and Chemical Toxicology*. 2003, vol. 41, issue 7, s. 943-964. ISSN 0278-6915.

8 SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

AEDA	Analýza ředěného extraktu vzorku <i>Aroma Extract Dilution Analysis</i>
ASE	Zrychlená extrakce rozpouštědlem <i>Accelerated Solvent Extraction</i>
CAR/PDMS	Carboxen/Polydimethylsiloxan
CE	Kapilární elektroforéza <i>Capillary Electrophoresis</i>
CPSC	Komise pro bezpečnost spotřebitelských výrobků <i>Consumer Products Safety Commission</i>
CW/DVB	Carbowax/Divinylbenzen
DAD	Detektor diodového pole <i>Diode Array Detector</i>
DID	Přímá tepelná desorpce <i>Direct Thermal Desorption</i>
DOE	Metoda plánování (řízení) experimentů <i>Design of experiment</i>
DRIFTS	Metoda difúzní reflexe <i>Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy</i>
DVB/CAR/PDMS	Divinylbenzen/Carboxen/Polydimethylsiloxan
EPA	Agentura pro ochranu životního prostředí <i>Environmental Protection Agency</i>
EU	Evropská unie <i>European Union</i>
FDA	Agentura pro kontrolu léčiv a potravin <i>Food and Drug Administration</i>
FEMA	Asociace výrobců aromat <i>Flavor and Extract Manufacturer's Association</i>
FID	Plamenově ionizační detektor <i>Flame Ionization Detection</i>
GC	Plynová chromatografie <i>Gas chromatography</i>
GC-O	Plynová chromatografie – olfaktometrie <i>Gas chromatography – olfactometry</i>
HPLC	Vysokoučinná kapalinová chromatografie <i>High Performance Liquid Chromatography</i>
HPSE	Vysokotlaková extrakce rozpouštědlem <i>High-Pressure Solvent Extraction</i>
HS	Headspace
IFRA	Mezinárodní asociace pro výzkum aromatických látek <i>International Fragrance Research Association</i>
L _k	Rozpustnost látky v ethanolu, k = obsah ethanolu (% obj.)
LC	Kapalinová chromatografie <i>Liquid Chromatography</i>

LOD	Limit detekce <i>Limit of detection</i>
LOQ	Limit kvantifikace <i>Limit of quantification</i>
LPME	Mikroextrakce kapalnou fází <i>Liquid Phase Microextraction</i>
MAE	Extrakce mikrovlnným ohřevem <i>Microwave-Assisted Extraction</i>
MDGC	Multidimenzionální plynová chromatografie <i>Multidimensional Gas Chromatography</i>
MEEKC	Mikroemulzní elektrokinetická chromatografie <i>Microemulsion Electrokinetic Chromatography</i>
MS	Hmotnostní spektrometrie <i>Mass Spectrometry</i>
MSPD	Extrakce disperzní tuhou fází <i>Matrix solid-phase dispersion</i>
OFAT	Jednorozměrná analýza dat <i>One Factor At Time</i>
PA	Polyakrylát
PDMS	Polydimetylsiloxan
PDMS/DVB	Polydimetylsiloxan/divinylbenzen
PFE	Extrakce stlačenou kapalinou <i>Pressurized fluid extraction</i>
PHWE	Extrakce stlačenou kapalnou horkou vodou <i>Pressurised Hot Water Extraction</i>
PLE	Tlaková kapalinová extrakce <i>Pressurized Liquid Extraction</i>
PSE	Tlaková extrakce rozpouštědlem <i>Pressurized Solvent Extraction</i>
qMS	kvadrupólový hmotnostní spektrometr <i>quadrupole Mass Spectrometry</i>
QRA	Kvantitativní hodnocení rizika <i>Quantitative Risk Assessment</i>
REXPAN	Panel expertů RIFM <i>RIFM Expert Panel</i>
RIFM	Výzkumný ústav aromatických látek <i>Research Institute for Fragrance Materials</i>
SBSE	Sorpční extrakce míchadlem <i>Stir Bar Sorptive Extraction</i>
SCCP	Vědecký výbor pro spotřební zboží <i>Scientific Committee on Consumer Products</i>
SCCPNFP	Vědecký výbor pro kosmetické produkty a nepotravinové produkty <i>Scientific Committee on Cosmetic Products and Non-Food Products</i>

SDE	Simultánní destilace a extrakce <i>Steam Distillation Extraction</i>
SDME	Mikroextrakce jednou kapkou <i>Single Drop Microextraction</i>
SEC	Vylučovací chromatografie <i>Size Exclusion Chromatography</i>
SFE	Superkritická Fluidní Extrakce <i>Supercritical Fluid Extraction</i>
SHWE	Extrakce superhorkou vodou <i>Superheated Water Extraction</i>
SIM	Režim sledování jednoho iontu <i>Single ion monitoring mode</i>
SPDE	Dynamická extrakce tuhou fází <i>Solid Phase Dynamic Extraction</i>
SPE	Extrakce tuhou fází <i>Solid Phase Extraction</i>
SPME	Mikroextrakce tuhou fází <i>Solid-Phase Microextraction</i>
SSE	Subkritická extrakce rozpouštědlem <i>Subcritical Solvent Extraction</i>
STE	Extrakce sorpční páskou <i>Sorptive Tape Extraction</i>
SWE	Subkritická extrakce vodou <i>Subcritical Water Extraction</i>
TOF	Průletový hmotnostní analyzátor <i>Time of Flight</i>
USAEMA	Ultrazvuková emulgace a mikroextrakce <i>Ultrasound-Assisted Emulsification-Microextraction</i>
USE	Ultrazvuková extrakce <i>Ultrasonic Extraction</i>
WD	Destilace vodní parou <i>Water Distillation</i>

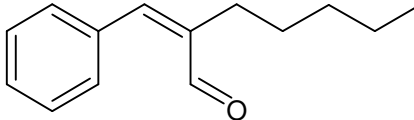
9 SEZNAM PŘÍLOH

- Příloha A Vlastnosti alergenních vonných látek
- Příloha B Chromatogram směsi standardů alergenních vonných látek
- Příloha C Vybrané chromatogramy reálných vzorků
- Příloha D Dotazník pro sensorické hodnocení zubních past
- Příloha E Dotazník pro sensorické hodnocení kosmetických výrobků
- Příloha F Dotazník pro sensorické hodnocení bylinných sypaných čajových směsí
- Příloha G Dotazník pro sensorické hodnocení porcovaných čajových směsí a žvýkacích gum
- Příloha H Dotazník pro sensorické hodnocení želatinových bonbónů a ovocných aromatizovaných alkoholických a nealkoholických nápojů
- Příloha I Životopis autora

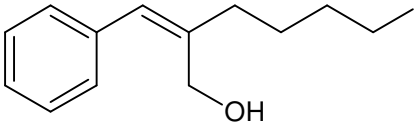
10 PŘÍLOHY

10.1 Příloha A: Vlastnosti alergenních vonných látek

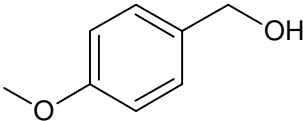
Tabulka 113 Vlastnosti α -Amylcinnamalu [158, 171, 181]

Název podle INCI	<i>Amyl cinnamal</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	α -amylcinnamaldehyd; α -pentyl skořicový aldehyd; 2-n-amyl-3-phenyl-propen-2-al; α -n-amyl- β -phenyl-acrolein; 2-benzylidenheptal; α -amylzimtaldehyd; α -amylcinnamaldehyde; jasminal; jasmínový aldehyd; 2-(fenylmethylen)-heptanal; heptanal, 2-(phenylmethylene)	
Identifikace látky	CAS	122-40-7
	Vzorec	C ₁₄ H ₁₈ O
	Mol. Hmotnost	202,29 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	žlutá, čirá kapalina
	Aroma	voní typicky jasmínově až liliově
	Teplota varu	287 - 290 °C
	Hustota	0,970 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	rozpustný v ethanolu a v olejích
	Rozpustnost v ethanolu (L ₈₀)	1 : 6
Výroba	Kondenzací benzaldehydu s heptanalem.	
Výskyt a použití	<p>Vyskytuje se v mnoha silicích květů, zvláště v silici z jasmínových květů. Je to velmi rozšířená aromatická látka, protože poskytuje velmi přirozenou jasmínovou vůni. Využívá se do jasmínových a mnoha dalších květinových kompozic a do některých aromat. Pro svou přirozenou jasmínovou vůni je používán k parfemaci různých výrobků chemického a potravinářského průmyslu např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> - v kosmetice, nejčastěji v mýdlech, - v potravinářství (ke zlepšení nebo zvýraznění chuti), - v čistících prostředcích a dalších výrobcích chemického průmyslu, např. v avivážních prostředcích aj. <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

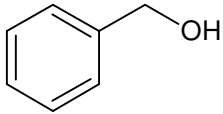
Tabulka 114 Vlastnosti Amylcinnamylalkoholu [158, 181, 177, 171]

Název podle INCI	<i>Amylcinnamyl alcohol</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	skořicový α -amylalkohol; α -pentylskořicový alkohol; 3-phenyl-2-pentylprop-2-en-1-ol; 2-benzylidene-1-heptanol; 2-(phenylmetylen)-1-heptanol; 2-(phenylmethylidene)heptan-1-ol; 2-amyl-3-phenyl-2-propen-1-ol; (2E)-2-pentyl-3-phenyl-2-propen-1-ol; amyl cinnamic alcohol; 2-pentyl cinnamyl alcohol; Buxinol	
Identifikace látky	CAS	101-85-9
	Vzorec	C ₁₄ H ₂₀ O
	Mol. Hmotnost	204,31 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá, čirá kapalina
	Aroma	lehká květinová vůně
	Teplota varu	> 200 °C
	Hustota	0,960 - 0,965 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	rozpustný v alkoholu, nerozpustný ve vodě
	Rozpustnost v ethanolu (L₇₀)	1 : 3
Výroba	Redukcí α -amylcinnamaldehydu.	
Výskyt a použití	Tato aromatická syntetická látka patří mezi ovocné příchutě používané v potravinářství a ve velké míře jako vůně v kosmetickém průmyslu. vyskytuje se např.: <ul style="list-style-type: none"> – v ovocných aromatizovaných čajích, cukrovinkách, nápojích aj., – v parfemovaných kosmetických výrobcích (dekorativní kosmetika, šampóny, toaletní mýdla) – v čistících prostředcích Řadí se do skupiny II v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.	

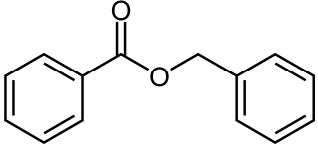
Tabulka 115 Vlastnosti Anisalkoholu [158, 181, 171]

Název podle INCI	Anise alcohol	
Strukturní vzorec		
Synonyma	methoxybenzyl alkohol; 4-methoxybenzyl alcohol; p-Anisyl alcohol; p-methoxybenzyl alkohol; p-Anisol alcohol; 4-methoxybenzene methanol; (4-methoxyphenyl)methanol	
Identifikace látky	CAS	105-13-5
	Vzorec	C ₈ H ₁₀ O ₂
	Mol. Hmotnost	138,16 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá až nažloutlá kapalina, výjimečně pevná látka
	Aroma	květinová vůně
	Teplota varu	259 °C
	Hustota	1,113 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	rozpustný v benzylalkoholu, nerozpustný v parafínových olejích a ve vodě
	Rozpustnost v ethanolu (L₅₀)	1 : 1
Výroba	Redukcí anisaldehydu.	
Výskyt a použití	<p>Vyskytuje se i v přírodě, např. v anýzových semínkách, v květech hyacintů, v medu, ve vanilkových luscích a v bourbonské whiskey. Je součástí vůní anýzu, květů jabloní, meruněk, banánů, karafiátu, černého rybízu, třešní, hroznů a řady dalších. Nachází se také v parfémovaných kosmetikách (výrobky běžného denního použití), ale i v drahých parfémeh.</p> <p>Používá se do květinových kompozic, jako je šeřík, heliotrop, mimóza apod., také do aromat typu broskev, fíky, kakao, vanilka, aj. Jedná se často používanou přísadu vonných směsí např. v:</p> <ul style="list-style-type: none"> – krémech, pudrech, – detergitech, – vonných svíčkách, – šamponech, vlasových sprejích a tužidlech, – vodách po holení a parfémeh aj. <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

Tabulka 116 Vlastnosti Benzylalkoholu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Benzyl alcohol</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	fenylmethanol; benzenemethanol; phenylcarbinol; phenylmethanol; α -hydroxytoluene; alcoholum benzylicum	
Identifikace látky	CAS	100-51-6
	Vzorec	C ₇ H ₈ O
	Mol. Hmotnost	108,13 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	čirá bezbarvá kapalina
	Aroma	nasládlá mandlově ovocná vůně
	Teplota varu	203 - 205 °C
	Hustota	1,043 - 1,046 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	dobře rozpustný ve vodě, mísitelný s ethanolem, s chloroformem, s éterem, s mastnými oleji a se silicemi
	Rozpustnost v ethanolu (L ₅₀)	1 : 1,5
Výroba	Z benzylchloridu.	
Výskyt a použití	<p>Může být přítomen v léčivech, kosmetických přípravcích a v řadě technických výrobků. Používá se také jako zalévací médium v mikroskopii. V kosmetických přípravcích různých typů se používá jako konzervační látka nebo rozpouštědlo pro želatinu, kasein, celulózoacetát, šelak (druh pryskyřice). Využívá se do parfémových kompozic typu jasmín, chypre, šerík, hyacinta, karafiát, tuberóza a jako rozpouštědlo pevných vonných látek.</p> <p>V potravinářství se využívá jako aditivum v ovocných nápojích, bonbonech nebo sirupech proti kašli aj. Do aromat peckovitého ovoce. V přírodě se nachází v jasmínu, pomerančových květech aj.</p> <p>Používá se ke konzervaci léčiv, především roztoků (injekčních roztoků (vit. B₁₂), roztoků aplikovaných v dutině ústní, např. kloktadla, oftalmologických roztoků).</p> <p>V průmyslu se využívá např. jako rozpouštědlo, ve fotografickém průmyslu také jako urychlovač jako součást vývojek barevných filmů nebo při výrobě barev, inkoustů, aj.</p> <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

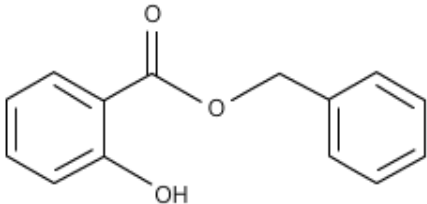
Tabulka 117 Vlastnosti Benzylbenzoátu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Benzyl benzoate</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	Benzyl ester kyseliny benzoové; fenylmethylbenzoát; benzylbenzoát; benzyl benzenecarboxylate; Malathion; Scabicide; Venzonate; Ascabiol; Novoscabin; Scabitox; Benylate; Peruscabin; Scabiozon; Quassia; Colebenz; Scabanca; Ascabin; Vanzoate	
Identifikace látky	CAS	120-51-4
	Vzorec	C ₁₄ H ₁₂ O ₂
	Mol. Hmotnost	212,26 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá viskózní kapalina
	Aroma	balzamickomandlová vůně
	Teplota varu	323 - 324 °C
	Hustota	1,120 - 1,125 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	mísitelný s 96% ethanolem, s etherem, s dichlormethanem, s mastnými oleji a se silicemi; rozpustný v acetonu; nerozpustný ve vodě
	Rozpustnost v ethanolu (L₉₀)	1 : 2
Výroba	Kondenzační produkt kyseliny benzoové a benzylalkoholu. Může být také vyroben z benzaldehydu pomocí Tishchenkovy reakce.	
Výskyt a použití	<p>V kosmetice se využívá jako stabilizátor dalších vonných látek v parfémeh nebo jako rozpouštědlo. Je přítomen:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v kosmetice pro osobní péči (vody po holení, pěny do koupele, čistící a tonizační přípravky na pleť, deodoranty, vlasové kondicionéry a šampony, rtěnky, hydratační krémy, laky na nehty), – v humánní a veterinární terapii jako ektoparazitikum (k léčbě svrabu a pedikulózy), – v průmyslu jako plastifikátor (při výrobě celulózy a dalších polymerů). <p>Používá se v potravinářství jako stabilizátor syntetických příchutí a do aromat pro hořkosladkou chuť.</p> <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

Tabulka 118 Vlastnosti Benzylcinnamátu [158, 181, 182, 171]

Název podle INCI	<i>Benzyl cinnamate</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	Benzyl ester kyseliny skořicové; phenylmethyl 3-phenylprop-2-enoate; benzyl-3-phenylprop-2-enoate; benzyl beta-phenyl acrylate; benzyl-3-phenyl propenoate; Cinnamein	
Identifikace látky	CAS	103-41-3
	Vzorec	C ₁₆ H ₁₄ O ₂
	Mol. Hmotnost	238,28 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bílá až světle žlutá krystalická látka, taje při pokojové teplotě
	Aroma	sladká vůně květů a plodů třešní
	Teplota varu	350 °C
	Hustota	1,128 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	Rozpustný v alkoholu, v dipropylen glykolu a v olejích, ve vodě pouze 9 mg.l ⁻¹ , nerozpustný v glycerinu a propylen glykolu
	Rozpustnost v ethanolu (L₉₀)	1 : 8
Výskyt a použití	<p>Pro svou příjemnou aromatickou vůni je široce používán v kosmetice. Je součástí mnoha složených vůní používaných při výrobě např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – kosmetiky pro osobní denní péči (vody po holení, pěny do koupele, deodoranty, vlasové kondicionéry a šampony, rtěnky, laky na nehty) – je součástí peruánského a toluánského balzámu – používá se do těžkých sladkých aromat <p>Řadí se do skupiny II v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

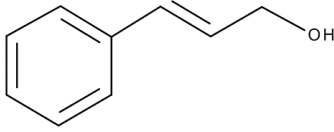
Tabulka 119 Vlastnosti Benzylsalicylátu [158, 181, 180, 171]

Název podle INCI	<i>Benzyl salicylate</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	benzyl salicylát; benzyl ester kyseliny salicylové; benzyl-2-hydroxybenzoát; phenylmethyl ester 2-hydroxybenzoic acid; benzyl-2-hydroxybenzoát; salicyl acid benzyl ester; salicyläurebenzylester	
Identifikace látky	CAS	118-58-1
	Vzorec	C ₁₄ H ₁₂ O ₃
	Mol. Hmotnost	228,26 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá látka, podchlazením tuhne a poté taje při 23 - 24 °C
	Aroma	slabá balzamická vůně, ovocná chuť
	Teplota varu	335 °C
	Hustota	1,178 - 1,181 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	málo rozpustný ve vodě, mísitelný s etanolem a éterem.
	Rozpustnost v ethanolu (L₉₀)	1 : 9
Výskyt a použití	<p>Benzylsalicylát slouží jako rozpouštědlo, ředidlo a fixativum vonných látek a může být přítomen v parfémeh, aromatizovaných kosmetických přípravcích, ale i v jiných parfémovaných roztocích. Je přítomen hlavně v samoopalovacích krémech a mlécích.</p> <p>Organický filtr pro UV záření, který je dnes málo používaný, stále se však používá v levných ochranných slunečních přípravcích nebo v prostředcích chránících předměty před UV zářením.</p> <p>Má antipyretický-analgetický účinek, a proto může být přítomen i v některých léčivech.</p> <p>Může být přítomen i v některých rostlinách (karafiáty, hvozdíky, aj.). Využívá se do některých aromat např. do rybízových.</p> <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

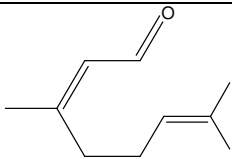
Tabulka 120 Vlastnosti Cinnamalu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Cinnamal</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	skořicový aldehyd; trans-3-phenyl-2-propenal; β-phenylacrolein; 3-fenylprop-2-enal; 3-phenyl-2-propenal; fenyl-2-propenal	
Identifikace látky	CAS	104-55-2
	Vzorec	C ₉ H ₈ O
	Mol. Hmotnost	132,16 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	žlutá až nazelenalá kapalina
	Aroma	voní a chutná skořicí
	Teplota varu	248 °C
	Hustota	1,048 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	rozpustný ve vodě a v etanolu, mísitelný s éterem, s chloroformem a s olejem
	Rozpustnost v ethanolu (L ₆₀)	1 : 5
Výroba	Z benzaldehydu a acetaldehydu.	
Výskyt a použití	<p>Je součástí mnoha éterických rostlinných olejů, např. levandulového, hyacintového a dalších. Je přítomen také v olejích z listů čajovníku a vinné révy. Ve velké míře je obsažen v kůře skořicovníku a v cassiovém oleji. V přírodě je složkou skořicových silic, ale je obsažen také v jiných silicích (pačulové a myrhové). Může být přítomen v mnoha výrobcích, např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v kosmetice, – v zubních pastách a ústních vodách pro zlepšení nebo zvýraznění chuti, – v čistících prostředcích a dalších výrobcích chemického průmyslu, např. v avivážních prostředcích, – v potravinářství např. v kořenících směsích, žvýkačkách, aj. <p>Řadí se do skupiny I v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

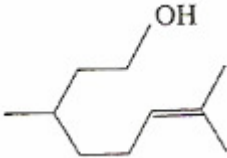
Tabulka 121 Vlastnosti Cinnamylalkoholu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Cinnamyl alcohol</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	skořicový alkohol; 3-phenyl-2-propen-1-ol; 3-fenylprop-2-en-1-ol; γ -phenylallyl alcohol; Styron; fenyl-2-propenol; Styryl carbinol; Zimtalkohol	
Identifikace látky	CAS	104-54-1
	Vzorec	$C_9H_{10}O$
	Mol. Hmotnost	$134,18 \text{ g.mol}^{-1}$
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	pevná látka
	Aroma	květinová až skořicová vůně, hořká chuť
	Teplota varu	$258 \text{ }^\circ\text{C}$
	Hustota	$1,0397 \text{ g.cm}^{-3} (35 \text{ }^\circ\text{C})$
	Rozpustnost	rozpustný ve vodě a glycerolu, snadno rozpustný v alkoholu, éteru a v jiných obvyklých rozpouštědlech
	Rozpustnost v ethanolu (L₆₀)	1 : 2
Výroba	Syntetizuje se ze styrenu nebo redukcí cinnamaldehydu.	
Výskyt a použití	<p>Skořicový alkohol je pro svou příjemnou fialkovou a hyacintovou vůni široce používán v kosmetice jako vonná látka. Vyskytuje se v parfémovaných kosmetikách, především ve výrobcích běžného denního používání. Používá se do mnoha květinových a kořenitých parfémových kompozic, jež současně fixuje a do aromat. Také se nachází např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v oleji z hyacintových květů a narcisových rostlin, – ve skořicové silici z listů a kůry, – v peruánském balzámu, – ve styraxu. <p>Řadí se do skupiny I v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

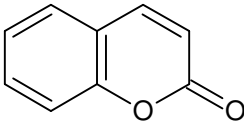
Tabulka 122 Vlastnosti Citralu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Citral</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	3,7-dimethyl-2,6-octadienal; 3,7-dimethyl-okta-2,6-dienal; Geranial; Lemonal; Geranialdehyde	
Identifikace látky	CAS	5392-40-5
	Vzorec	C ₁₀ H ₁₆ O
	Mol. Hmotnost	152,24 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	olejovitá kapalina nažloutlé barvy
	Aroma	citrónová vůně a nahořklá chuť
	Teplota varu	229 °C
	Hustota	0,885 - 0,895 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	dobře mísitelný s ethanolem a éterem
	Rozpustnost v ethanolu (L ₇₀)	1 : 2
Výroba	<p>Izoluje se ze silic, především lemongrasové a Litsea cubeba. Vyrábí se synteticky oxidací geraniolu nebo linaloolu, popřípadě z geranylchloridu. Vzniká také přesmykem dehydrolinaloolu. Je možné ho získat z citrónového oleje kyselým siřičitanem.</p>	
Výskyt a použití	<p>Citral je nenasycený terpenický aldehyd. Vyskytuje se ve dvou izomerech (geranial a neral). Obchodní produkt obsahuje vždy oba izomery. Kondenzací citralu s acetonem a následnou cyklizací se připravuje směs jononů (aromatické sloučeniny s vůní po fialkách a malinách). Geranial je obsažen v citrusových plodech, v citrónové silici tvoří až 80 % a olejích dalších rostlin.</p> <p>Citral je běžnou aromatickou látkou a je přítomen v mnoha rostlinách a přidává se jako vonná látky do mnoha výrobků. Je přítomen např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v citrusových olejích, – v čajových směsích, – v kosmetice (citrónová vůně), v parfumerii (hlavně do kolínských vod a citrusových vůní), – v potravinářství do odpovídajících aromat, – v různých výrobcích ke korekci zápachu, – v insekticidních atraktantech. <p>Řadí se do skupiny II v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

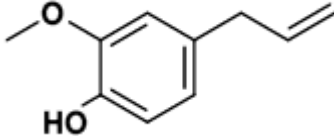
Tabulka 123 Vlastnosti Citronellolu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Citronellol</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	3,7-dimethyl-6-octen-1-ol; 2,6-dimethyl-2-octen-8-ol; 3,7-dimethylokt-6-en-1-ol; 3,7-dimethyl-6-okten-1-ol; Cefrol; Rhodinol; Cephrol, dihydrogeraniol	
Identifikace látky	CAS	106-22-9
	Vzorec	C ₁₀ H ₂₀ O
	Mol. Hmotnost	156,27 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	světle žlutá olejovitá kapalina
	Aroma	nasládlá vůně květů, růže, kůže, stařinky a s jemnou nuancí citrusů
	Teplota varu	225 °C
	Hustota	0,852–0,857 g.cm ⁻³ (25 °C)
	Rozpustnost	mísitelný s ethanolem a s petrolejem, nerozpustný ve vodě
Výroba	Vyrábí se redukcí geraniolu, citralu nebo citronellalu. Opticky aktivní se syntetizuje z pinenu. Také se získává destilací listů rostlin.	
Výskyt a použití	<p>Přírodní acyklický monoterpénoid přítomný ve více než 30 rostlinných olejích, v černém čaji a mnoha druzích ovoce (např. citrusy). V přírodním citronella oleji, známém ve dvou varietách jako Ceylonský nebo Jávský olej, se vyskytuje ve formě (+)citronellolu (pravotočivý). Ve formě (-)citronellolu (levotočivý) je přítomen i v růžovém nebo geraniovém oleji. Používá se k ochucování nápojů. Přidává se jako vonná látka do mnoha výrobků. Je přítomen např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v mnoha přírodních rostlinných olejích, – v kosmetice (do parfémových kompozic typu růže, geránie), – v čajových směsích a některých exotických nápojích, – v různých výrobcích ke korekci zápachu, – v insekticidních atraktantech a pesticidech. <p>Řadí se do skupiny II v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

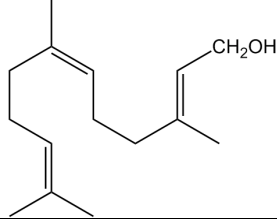
Tabulka 124 Vlastnosti Kumarinu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Coumarin</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	<p>γ-lakton kys. 3-(2-hydroxyfenyl)-2-propenové; anhydrid kys. o-kumarové; 3-(2-hydroxyphenyl)-2-propenoic acid delta-lacton; 2H-1-benzopyran-2-one; 2-oxo-1,2-benzopyran; 1,2-benzopyrone; 2H-benzo(beta)pyran-2-one;</p>	
Identifikace látky	CAS	91-64-5
	Vzorec	C ₉ H ₆ O ₂
	Mol. Hmotnost	146,15 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bílá lesklá krystalická látka
	Aroma	vůně lučního sena, podobné vanilce
	Teplota varu	301 °C
	Hustota	0,935 g.cm ⁻³ (20 °C)
	Rozpustnost	rozpustný ve většině organických rozpouštědlech a ve vodě
	Rozpustnost v ethanolu (L ₉₅)	1 : 10
Výroba	<p>Připravuje se synteticky působením anhydridu kyseliny octové na salicylový aldehyd za přítomnosti octanu sodnatého.</p>	
Výskyt a použití	<p>Je obsažen jako glykosid v některých rostlinách (Mařinka vonná, Komonice lékařská, Tomka vonná, Routa vonná, Vstavač nachový aj.). Používá se v parfumerii jako fixativum vůně, do parfémových kompozic s vůní sena, levandule, heliotropu a v potravinářství např. v aromatických alkoholických nápojích (Zubrowka). Tzv. „mařinkové víno“ se připravuje macerací tomky vonné ve víně nebo přidáním krystalku kumarinu do láhve vína.</p> <p>Je přítomen např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v kosmetice (parfémy, mýdla, deodoranty aj.), – v potravinářství, – v antikoagulačních lécích (Warfarin), – v různých výrobcích ke korekci zápachu, – v přípravcích k hubení hlodavců (Rattex). <p>Řadí se do skupiny II v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

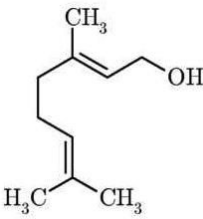
Tabulka 125 Vlastnosti Eugenolu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Eugenol</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	4-allylbenzkatechin-2-methyläther; 4-hydroxy-3-methoxy-1-allyl-benzol; 4-allylkatechol-2-methyl ether; 4-allyl-2-methoxyphenol; 2-methoxy-4(2-propenyl)-phenol; 4-allyl-2-methoxy phenol caryophyllic acid; 1-hydroxy-2-methoxy-4-prop-2-enylbenzene; 4-allylguajakol; Eugenol; 4-Allylguaiacol	
Identifikace látky	CAS	97-53-0
	Vzorec	C ₁₀ H ₁₂ O ₂
	Mol. Hmotnost	164,21 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá kapalina hnědnoucí na vzduchu a na světle
	Aroma	voní hřebíčkem a karafiátem
	Teplota varu	254 °C
	Hustota	1,067 g.cm ⁻³ (25 °C)
	Rozpustnost	rozpustný v ethanolu, v chloroformu, v etheru a v oleji, prakticky nerozpustný ve vodě
	Rozpustnost v ethanolu (L ₅₀)	1 : 6
Výroba	Alkalickou extrakcí hřebíčkové silice nebo synteticky z guajakolu a allylchloridu nebo allylalkoholu.	
Výskyt a použití	<p>Eugenol patří mezi rozšířené aromatické substance, v parfumerii se využívá do orientálních a karafiátových vůní. Má antiseptické, antibakteriální a bolest tišící účinky. Je součástí karafiátového a skořicového oleje. Je přítomen v muškátovém oříšku a v četných silicích, hlavně hřebíčkové. Dále se využívá do aromat na zubní pasty a ústní vody, kde současně působí dezinfekčně a k výrobě kořenitých aromat. Dále ve farmacii a k výrobě vanilinu.</p> <p>Také je pravidelnou součástí:</p> <ul style="list-style-type: none"> – většiny komerčně vyráběných otiskových hmot ve stomatologii, – většiny parfémových směsí, – mnoha insekticidů (hmyzích atraktantů). <p>Řadí se do skupiny II v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

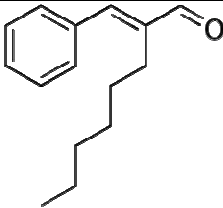
Tabulka 126 Vlastnosti Farnesol [158, 181, 179, 171]

Název podle INCI	<i>Farnesol</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	3,7,11-trimethyl-2,6,10-dodecatrien-1-ol; 2,6,10-dodecatrien-1-ol; Stirrup	
Identifikace látky	CAS	4602-84-0
	Vzorec	C ₁₅ H ₂₆ O
	Mol. Hmotnost	222,37 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá čirá kapalina
	Aroma	sladká květinová vůně
	Teplota varu	283 °C
	Hustota	0,885 - 0,888 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	dobře mísitelný s oleji, nerozpustný ve vodě
	Rozpustnost v ethanolu (L ₇₀)	1 : 3
Výroba	Syntetizuje se z geranylacetonu.	
Výskyt a použití	<p>Sesquiterpenalkohol farnesol patří do skupiny alifatických terpenů. Je přítomen v mnoha rostlinných olejích jako jsou růžový, citronella, neroli, cyklámen, moschus nebo v peruánském a v toluánském balsámu. Vyskytuje se také v květech pomerančovníku, růže, jasmínu, konvalinek nebo lípy. Používá se do aromat typu banán, broskev, meruňka, malina, rybíz apod. Přidává se jako vonná látka do mnoha výrobků. Je přítomen např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v kosmetice (parfémy, deodoranty, mýdla), – v cigaretách, – v různých výrobcích ke korekci zápachu, – v insekticidních atraktantech. <p>Řadí se do skupiny I v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

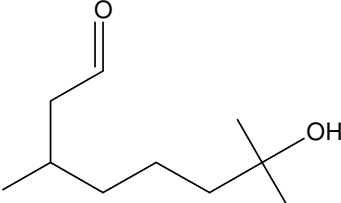
Tabulka 127 Vlastnosti Geraniolu [158, 181, 176, 183, 171]

Název podle INCI	<i>Geraniol</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	geraniový olej; 6-cis-2,6-dimethyloctadien-2,6-ol-8; 3,7-dimethyl-2,6-octadien-1-ol; 2,6-dimethyl-2,6-octadien-8-ol; (2E)-3,7-dimethylokta-2,6-dien-1-ol; Lemonol	
Identifikace látky	CAS	106-24-1
	Vzorec	C ₁₀ H ₁₈ O
	Mol. Hmotnost	154,25 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá až slabě žlutá kapalina
	Aroma	růžově květinová vůně
	Teplota varu	230 °C
	Hustota	0,889 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	mísitelný s ethanolem a s éterem, nerozpustný ve vodě
	Rozpustnost v ethanolu (L ₇₀)	1 : 2
Výroba	Izolací ze silic, např. citronellové nebo palmorůžové; přesmykem linalloolu; hydrogenací citralu nebo syntézou z β-pinenu přes myrcen.	
Výskyt a použití	<p>Geraniol je sám o sobě slabý sensibilizátor, ale na vzduchu spontánně autooxiduje a vytváří vysoce alergenní sloučeniny. Je přítomen ve většině rostlinných silic, poskytuje vůni růže. Používá se do mnoha květinových kompozic, nejčastěji do typů jako růže, geránie, jasmín, neroli, lípa, ylang-ylang a přidává se jako vonná látka do mnoha výrobků. Je přítomen např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v rostlinách (růžích, levanduli, jasmínu, pelargóniích, kakostu aj.), – v kosmetice, – v léčivech pro zevní použití ke korekci zápachu, – v insekticidních atraktantech. <p>Využívá se také do aromat jako ananas, jablko, broskev nebo meruňka. Pro svůj mírný antiseptický účinek bývá přidáván i k antiseptickým přípravkům (masti, stomatologické přípravky aj.).</p> <p>Řadí se do skupiny II v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

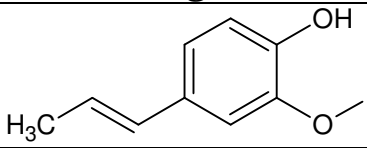
Tabulka 128 Vlastnosti α -Hexylcinnamalu [158, 181, 171]

Název podle INCI	Hexyl cinnamal	
Strukturní vzorec		
Synonyma	α -hexylcinnamaldehyde; 2-hexyl-3-fenyl-2-propenal; 2-benzylidenoktanal; α -n-hexyl- β -phenyl acrolein; caproaldehyde; octanal, 2-(phenylmethylene); HCA	
Identifikace látky	CAS	101-86-0
	Vzorec	C ₁₅ H ₂₀ O
	Mol. Hmotnost	216,35 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá až nažloutlá kapalina
	Aroma	jasmínová vůně jemnější než α -amylcinnamal
	Teplota varu	308 °C
	Hustota	0,95 g.cm ⁻³
	Rozpustnost	rozpustný ve vodě a v ethanolu, mísitelný s éterem, s chloroformem a s olejem
	Rozpustnost v ethanolu (L ₉₀)	1 : 1
Výroba	Kondenzací benzaldehydu s oktánalem.	
Výskyt a použití	Hexylcinnamal je aromatický nenasycený aldehyd chemicky blízký α -amylcinnamalu. Získává se z rychle rostoucí liány domovem v Číně, Indii a na Srí Lance, která kvete na jaře a na začátku léta. Je pro svou příjemnou vůni, ale hlavně cenovou dostupnost, široce používán v kosmetice a v mnoha parfemovaných výrobcích jako např.: <ul style="list-style-type: none"> – antiperspiranty, pěny do koupele, deodoranty, mýdla, šampony aj., – v čistících prostředcích a dalších výrobcích chemického průmyslu (avivážní prostředky), – ke korekci vůně detergentů. Také se používá do aromat. Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.	

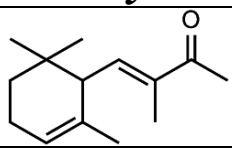
Tabulka 129 Vlastnosti Hydroxycitronellalu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Hydroxycitronellal</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	3,7-dimethyl-7-hydroxyoctanal; 7-hydroxy-3,7-dimethyloctan-1-al; Lavrine; Hydronal; Cyclosia; Majal	
Identifikace látky	CAS	107-75-5
	Vzorec	C ₁₀ H ₂₀ O ₂
	Mol. Hmotnost	172,26 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá viskózní kapalina
	Aroma	jemná sladká konvalinková až liliová vůně
	Teplota varu	241 °C
	Hustota	0,920 - 0,925 g.cm ⁻³ (20 °C)
	Rozpusťnost v ethanolu (L ₅₀)	1 : 1
Výroba	Hydratací citronellalu.	
Výskyt a použití	<p>Silně aromatická syntetická látka, která je součástí vůně „lípy“ nebo „konvalinky“. Je přidávána ke všem vůním květů pro zesílení aroma. Používá se do květinových kompozic, hlavně typu konvalinka, lípa, lilie, cyklámen, rezeda a magnolie. Také do některých aromat (např. med, lípa). Pro své aromatické vlastnosti se používá ke korekci vůní např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v kosmetice (kolínské vody, parfémy, vody po holení, mýdla aj.), – jako zesilující součást již parfémovaných výrobků, – čistících prostředků v domácnosti, – insekticidů a osvěžovačů vzduchu. <p>Může být příčinou hyperpigmentací na kůži.</p> <p>Řadí se do skupiny I v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

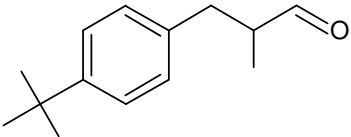
Tabulka 130 Vlastnosti Isoeugenolu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Isoeugenol</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	4-hydroxy-3-methoxy-1-propenylbenzene; 4-propenyl-brenzcatechin-2-methyl)äther; 4-propenylguajacol; 2-methoxy-4-propenylphenol; 4-hydroxy-3-methoxy-propenylbenzol; 2-methoxy-4-(prop-1-en-1-yl)fenol	
Identifikace látky	CAS	97-54-1
	Vzorec	C ₁₀ H ₁₂ O ₂
	Mol. Hmotnost	164,21 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá až nažloutlá viskózní kapalina
	Aroma	karafiátová vůně
	Teplota varu	266 °C
	Hustota	1,082 g.cm ⁻³ (25 °C)
	Rozpustnost	velmi málo rozpustný ve vodě, mísitelný s alkoholem a s éterem
	Rozpustnost v ethanolu (L₅₀)	1 : 5
Výroba	Přesmykem eugenolu, popř. ze safrolu. Z guajakolu lze získat přímo isoeugenol přes 4-hydroxy-3-methoxypropiofenon.	
Výskyt a použití	<p>Isoeugenol je velmi rozšířenou aromatickou látkou. V přírodě se vyskytuje v <i>cis</i>-formě (karafiátová silice) a <i>trans</i>-formě (bazalková silice). Testovací látka isoeugenolu je směs <i>cis/trans</i> izomerů. Vyskytuje se v mnoha rostlinách a v éterických olejích např. v hřebíčkovém oleji. Oxidací isoeugenolu vzniká vanilin.</p> <p>Používá se ke korekci vůně např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v dentálních materiálech, – v aromatizovaných čajích a jiných výrobcích potravinářského průmyslu, např. v kořenících směsích aj. <p>Řadí se do skupiny I v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

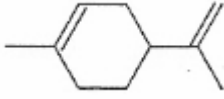
Tabulka 131 Vlastnosti α -Isomethyl iononu [158, 181, 178, 171]

Název podle INCI	α-Isomethyl ionone	
Strukturní vzorec		
Synonyma	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohex-2-en-1-yl)but-3-en-2-on; 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohex-2-enyl)pent-1-en-3-one; (4E,6E)-7,11-dimethyldodeca-4,6,10-trien-3-one; Cetona alpha; Methyl ionone gamma coeur	
Identifikace látky	CAS	127-51-5
	Vzorec	C ₁₄ H ₂₂ O
	Mol. Hmotnost	206,32 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá až nažloutlá kapalina
	Aroma	jemná fialkovo-irisová vůně
	Teplota varu	238 °C
	Hustota	0,933 g.cm ⁻³ (20 °C)
	Rozpustnost	rozpustný v alkoholu, nerozpustný ve vodě
	Rozpustnost v ethanolu (L₇₀)	1 : 3
Výroba	Z citralu a ethylmethylketonu.	
Výskyt a použití	<p>α-isomethyl ionone je synteticky vyrobenou látkou květinového typu a je mísitelná s mnoha dalšími vonnými substancemi. V přírodě se nevyskytuje.</p> <p>Je často složkou zcela rozdílných vůní (od různých berry, přes kůži až k borovicovému jehličí nebo růži), a proto je obtížné specifikovat nějakou skupinu kosmetických výrobků, kde by se tato látka vyskytovala častěji.</p> <p>Používá se jako součást vůně různých kosmetických výrobků, do květinových parfémových kompozic a některých ovocných aromat.</p> <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

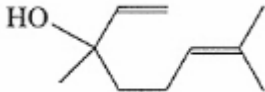
Tabulka 132 Vlastnosti Lilialu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Butylphenyl Methylpropional</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	Lilial; 2-(4-tert-butylbenzyl)propionaldehyde; 2-(4-tert-butylbenzyl)propanal; 3-(4-tert-butylphenyl)butanal; 4-(dimethylethyl- α -(1,1-methyl) benzene propanal; Lilestralis; Lysmeral; Lilyall; Mefloral	
Identifikace látky	CAS	80-54-6
	Vzorec	C ₁₄ H ₂₀ O
	Mol. Hmotnost	204,31 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá nebo lehce nažloutlá olejovitá kapalina
	Aroma	květinová vůně připomínající lipový květ
	Teplota varu	238 °C
	Hustota	0,942 - 0,949 g.cm ⁻³ (25 °C)
	Rozpustnost	rozpustný v alkoholu, v parafinovém oleji, ve vodě pouze 38 mg.l ⁻¹
	Rozpustnost v ethanolu (L ₈₀)	1 : 3
Výroba	Z <i>p</i> -terc. butylbenzaldehydu a propanalu.	
Výskyt a použití	<p>Lilial aldehyd je synteticky vyrobenou vonnou látkou, která se v přírodě nevyskytuje. Nejčastěji se používá v kosmetice a to především v mýdlech, šamponech a různých detergentech.</p> <p>Používá se do sladkých parfémových kompozic, zvláště květinových typů, jako konvalinka, lilie, cyklámen, lípa.</p> <p>Řadí se do skupiny II v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

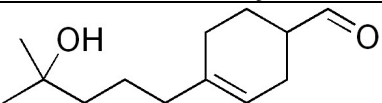
Tabulka 133 Vlastnosti Limonenu [158, 181, 184, 171]

Název podle INCI	<i>Limonene</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	D-limonen; D-limonene; 1-methyl-4-prop-1-en-2-yl cyclohexene; (4R)-1-methyl-4-prop-1-en-2-yl cyclohexene; Meadione; Carvene; Dextro-limonene; (R)-1-methyl-4-(1-methyl ethenyl) cyclohexene; (R)-1-methyl-4-isopropenyl-1-cyklohexan; (R)-p-mentha-1,8-diene	
Identifikace látky	CAS	5989-27-5
	Vzorec	C ₁₀ H ₁₆
	Mol. Hmotnost	136,23 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá kapalina
	Aroma	svěží citrusová vůně, na vzduchu oxiduje a získává nepříjemnou až kmínovou vůni
	Teplota varu	176 °C
	Hustota	0,840 - 0,850 g.cm ⁻³ (25 °C)
	Rozpustnost	rozpustný v alkoholu, olejích, kerosinu, parfémovém oleji, ve vodě se rozpouští pouze 14 mg.l ⁻¹ ; nerozpustný v propylen glykolu
Výroba	Izoluje se z citrusových terpenů.	
Výskyt a použití	<p>V přírodě se vyskytuje především opticky aktivní. Racemická forma se nazývá dipenten. Je velmi rozšířenou vonnou látkou. Vyskytuje se v grapefruitech, v citrónech, v limetkách, v pomerančích, v pepři, v australském tea tree oleji a v muškátovém oříšku. Přirozeně se vyskytuje v D-formě v různých esenciálních olejích a hojně se nachází v potravinářských produktech obecně jako aromatická látka. Vyskytuje se v mnoha výrobcích, které mají vůni citrusových plodů. Používá se do svěžích parfémových kompozic, hlavně typu kolínských vod. Přírodní pravotočivý se využívá do aromat. Používá se k výrobě syntetických vonných látek.</p> <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

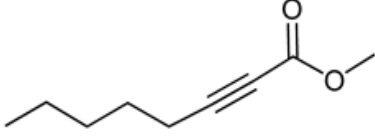
Tabulka 134 Vlastnosti Linaloolu [158, 181, 185, 171]

Název podle INCI	<i>Linalool</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-ol; 3,7-dimethyl-3-hydroxy-1,6-octadiene; Allo-ocimenol; 2,6-dimethyl octa-2,7-dien-6-ol; (3S)-3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-ol	
Identifikace látky	CAS	78-70-6
	Vzorec	C ₁₀ H ₁₈ O
	Mol. Hmotnost	154,25 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá kapalina
	Aroma	výrazná květinová vůně připomínající konvalinky
	Teplota varu	198 - 199 °C
	Hustota	0,858 - 0,868 g.cm ⁻³ (25 °C)
	Rozpustnost	rozpustný v olejích, parafínovém oleji, v propylen glykolu; ve vodě se rozpouští 1590 mg.l ⁻¹ ; nerozpustný v glycerinu
	Rozpustnost v ethanolu (L₆₀)	1 : 4
Výroba	Izolací ze silic nebo parciální hydrogenací dehydrolinaloolu, popřípadě z myrcenu přes acetát.	
Výskyt a použití	<p>Linalool je nenasycený uhlovodík (alkohol) a na vzduchu podléhá autoxidaci. Primárními oxidačními produkty jsou hydroperoxydy, reaktivní sloučeniny, které mohou být potenciálními senzibilátory. Čistý linalool sám o sobě není senzibilizátorem. V přírodě se vyskytuje v mnoha silicích, např. v silici koriandrové. V koncentrovaném stavu připomíná vůně květy citrusů nebo divoké růže. Byla zjištěna v přírodě v jablečné, mandarinkové a pomerančové šťávě, v meruňkách, broskvích, jahodách, švestkách, gardeniích, levanduli, mrkvi, bergamotovém oleji, majoránce, tymiánu, kardamonu, koriandru, brusinkách aj. Používá se v kosmetických výrobcích, hlavně v pěnách do koupele, šamponech, tekutých i pevných mýdlech a ve sprejích na vlasy, do mnoha květinových kompozic a svěžích arómat.</p> <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

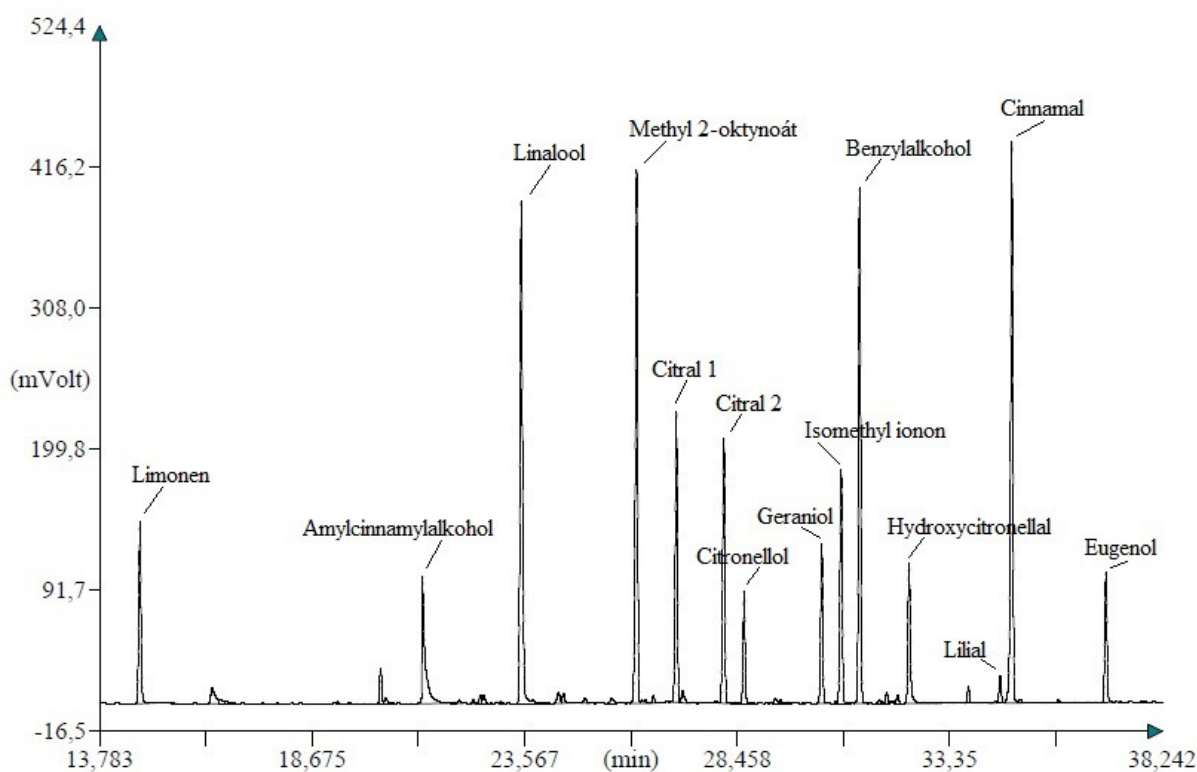
Tabulka 135 Vlastnosti Lyrálu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Hydroxyisohexyl 3-cyclohexene carboxaldehyde</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	4-(4-hydroxy-4-methylpentyl)-3-cyklohexen-1-karboxaldehyd	
Identifikace látky	CAS	31906-04-4
	Vzorec	C ₁₃ H ₂₂ O ₂
	Mol. Hmotnost	210,00 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá viskózní kapalina
	Aroma	sladká květinová vůně lilií nebo cyklámenů
	Teplota varu	319 °C
	Hustota	0,995 g.cm ⁻³ (20 °C)
	Rozpustnost	dobře mísitelný se 70% až 96% ethanolem
Výroba	z myrcenu; Diels-Alder kondenzací z myrcenolu nebo hydratací dvojně vazby myrcenalu v kyselém prostředí	
Výskyt a použití	<p>Připomíná charakter hydroxycitronellalu, který často v parfémových směsích nahrazuje. Vyznačuje se extrémně dlouhou dobou působení a difusibilitou. Používá se v parfumerii do květinových kompozic typu konvalinka, šeřík, hyacinta apod.</p> <p>Přidává se jako vonná látky do mnoha výrobků. Je přítomen např.:</p> <ul style="list-style-type: none"> – v alkoholických lotiích; – v antiperspirantech a deodorantech; – v perborátových a TAED detergentech, nebo v avivážních prostředcích; – v šamponech a mýdlech; – v mnoha dalších parfémovaných výrobcích ke korekci zápachu. <p>Řadí se do skupiny I v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

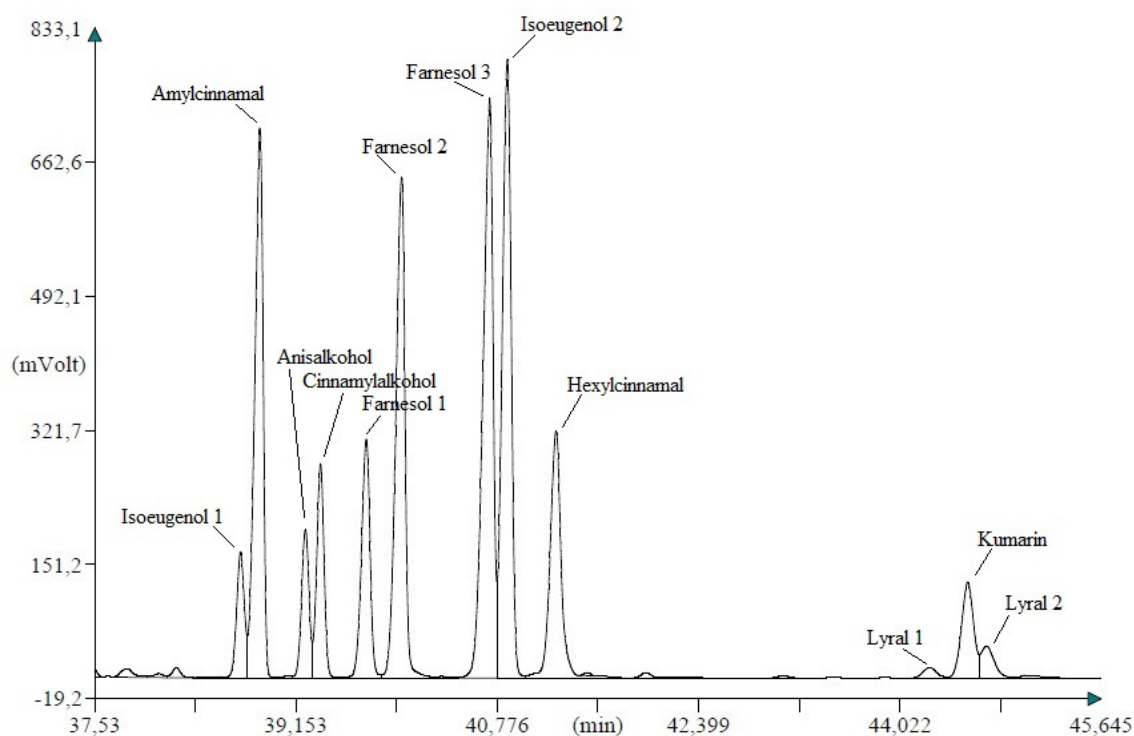
Tabulka 136 Vlastnosti Methyl 2-oktynoátu [158, 181, 171]

Název podle INCI	<i>Methyl 2-octynoate</i>	
Strukturní vzorec		
Synonyma	methyl heptin karbonát; methyl oct-2-yonate; methyl 2-octinate; methyl hept-1-yne-1-carboxylate; methyl ester 2-octynoic acid; methyl pentyl acetylen ecarboxylate; methyl 2-octynoate; Folione	
Identifikace látky	CAS	111-12-6
	Vzorec	C ₉ H ₁₄ O ₂
	Mol. Hmotnost	154,21 g.mol ⁻¹
Fyzikální a chemické vlastnosti	Skupenství, vzhled	bezbarvá nebo lehce nažloutlá kapalina
	Aroma	vůní připomíná fialkové listy
	Teplota varu	217 - 220 °C
	Hustota	0,92 - 0,93 g.cm ⁻³ (25 °C)
	Rozpustnost	rozpustný v alkoholu, v dipropylenglykolu a v olejích, nerozpustný ve vodě a v glycerinu
	Rozpustnost v ethanolu (L ₇₀)	1 : 5
Výskyt a použití	<p>Synteticky vyrobená látka, v přírodě se nevyskytuje. Je velmi dobře mísitelná s ostatními vonnými substancemi. Je častou složkou zcela rozdílných vůní (banán, různé-berry, jasmín), a proto se často používá jako součást vůně různých kosmetických výrobků.</p> <p>Využívá se do květinových a zelených fantazií a do aromat jako je víno, jahoda aj.</p> <p>Řadí se do skupiny III v potenciálu pro vyvolání kontaktní alergie.</p>	

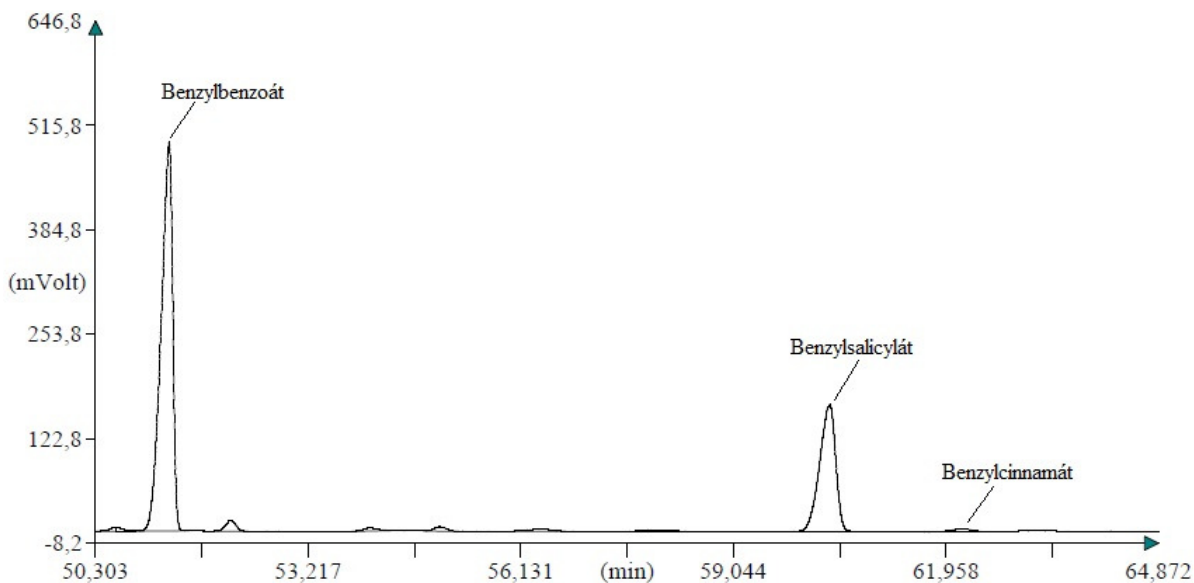
10.2 Příloha B: Chromatogram směsi standardů alergenních vonných látek



Obr. 49 Chromatogram směsi standardů alergenních vonných látek (retenční časy 14,71 - 36,92). Retenční časy standardů viz Tabulka 13.

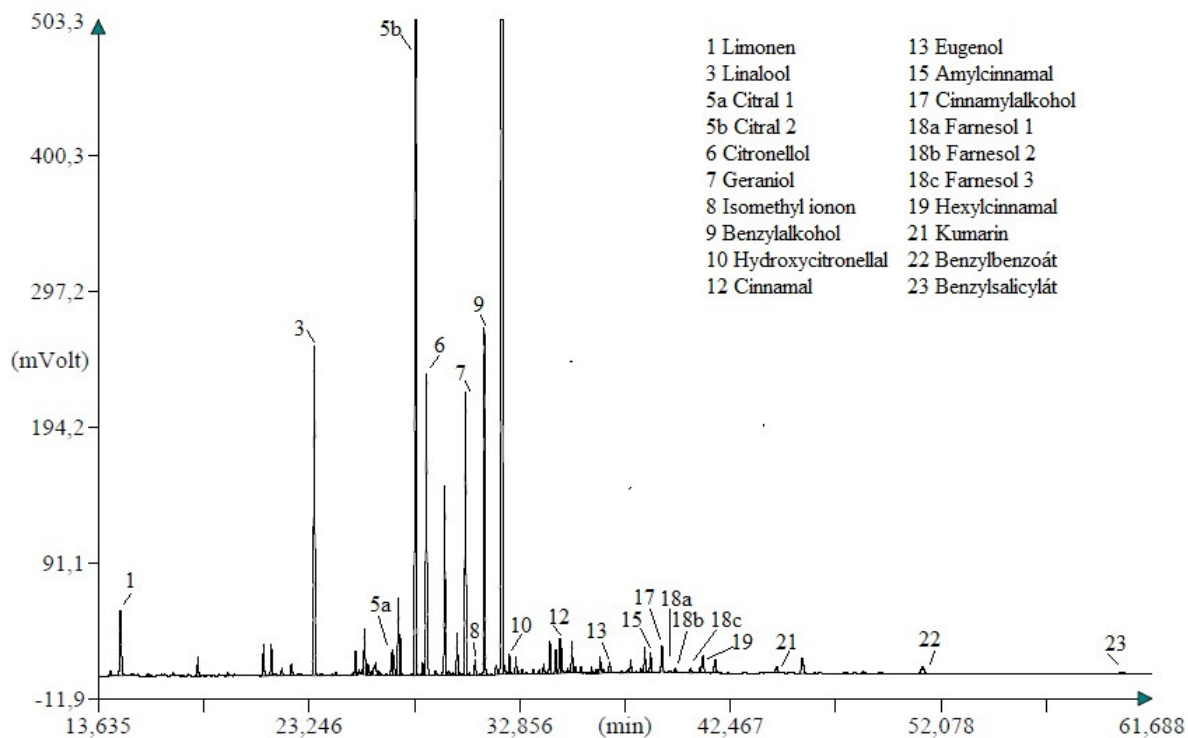


Obr. 50 Chromatogram směsi standardů alergenních vonných látek (retenční časy 38,70 - 44,80). Retenční časy standardů viz Tabulka 13.

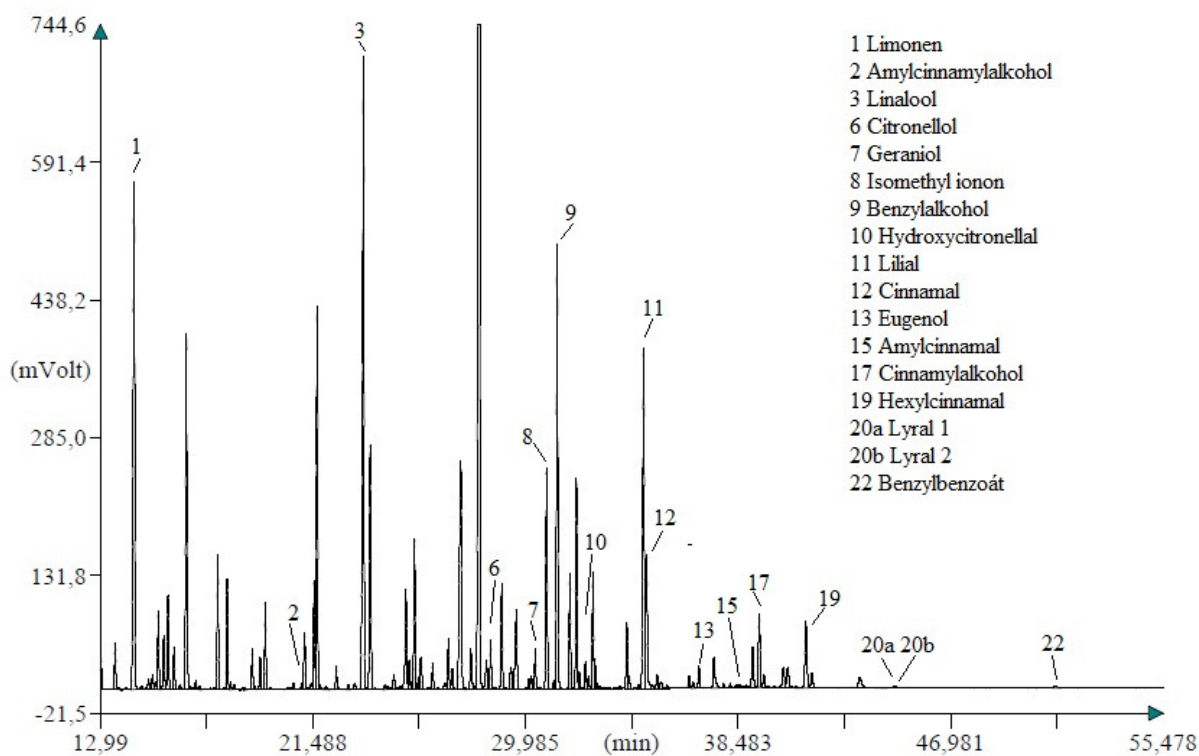


Obr. 51 Chromatogram směsi standardů alergenních vonných látek (retenční časy 51,17 - 63,52). Retenční časy standardů viz Tabulka 13.

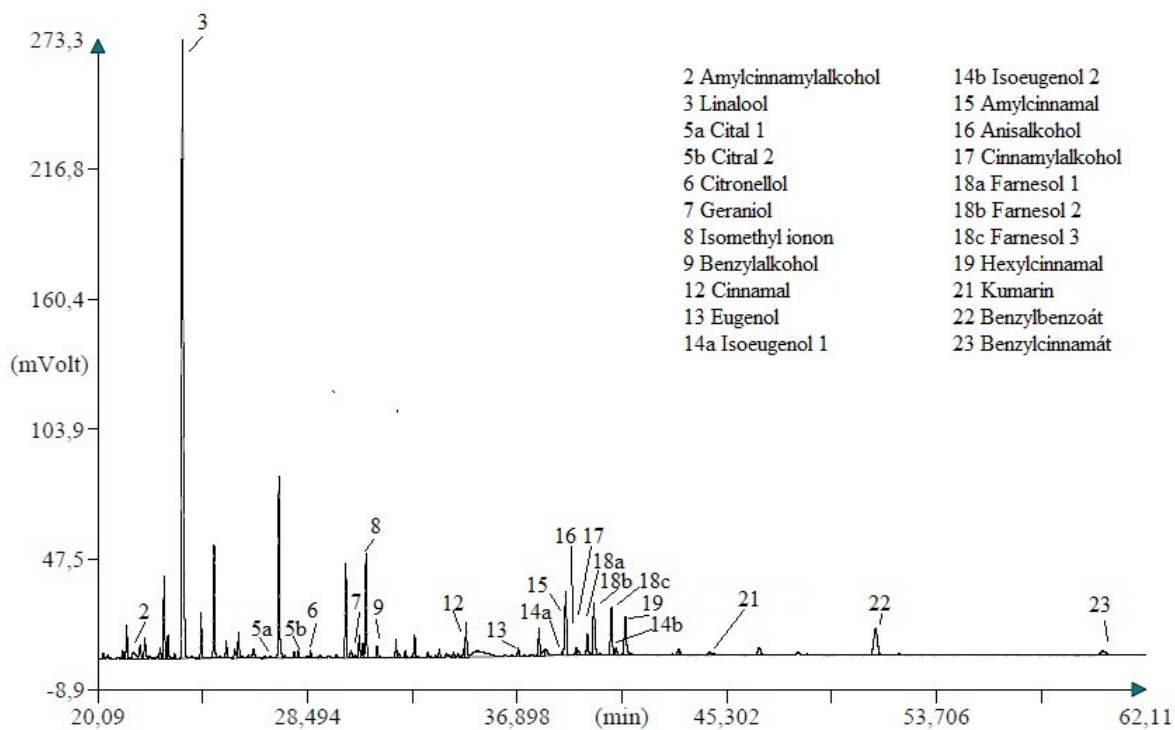
10.3 Příloha C: Vybrané chromatogramy reálných vzorků



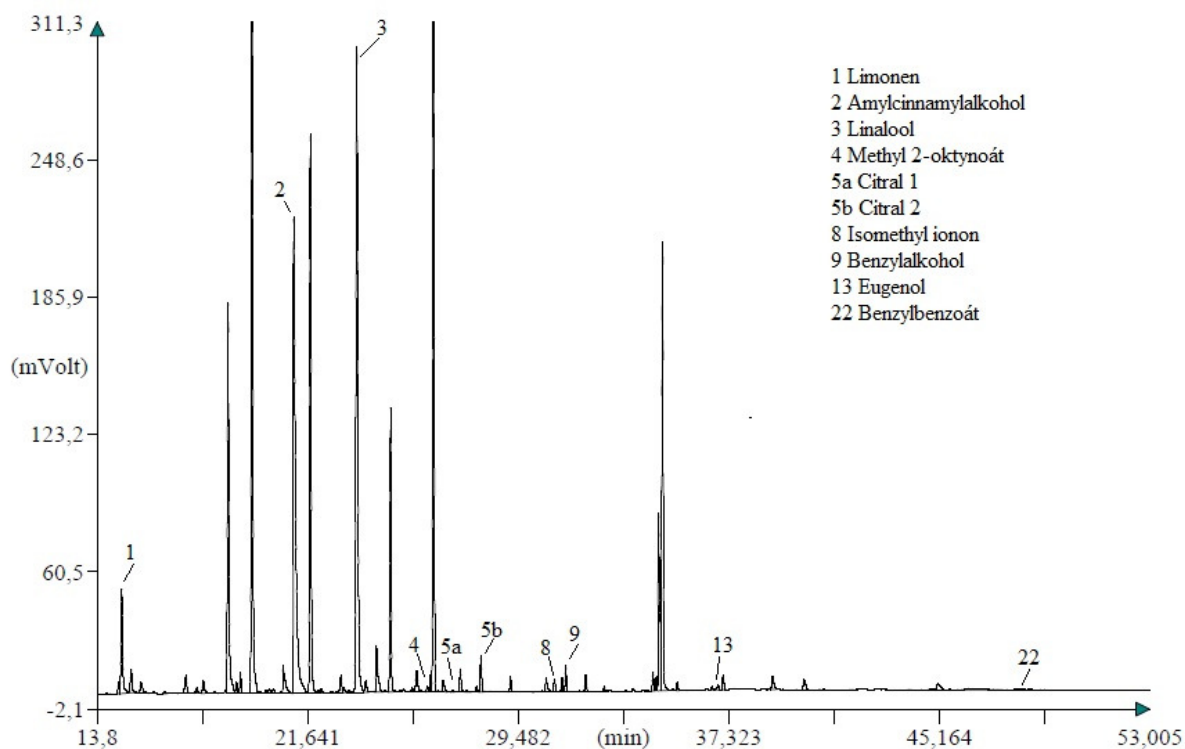
Obr. 52 Chromatogram reálného vzorku - přírodní olivový krém K5



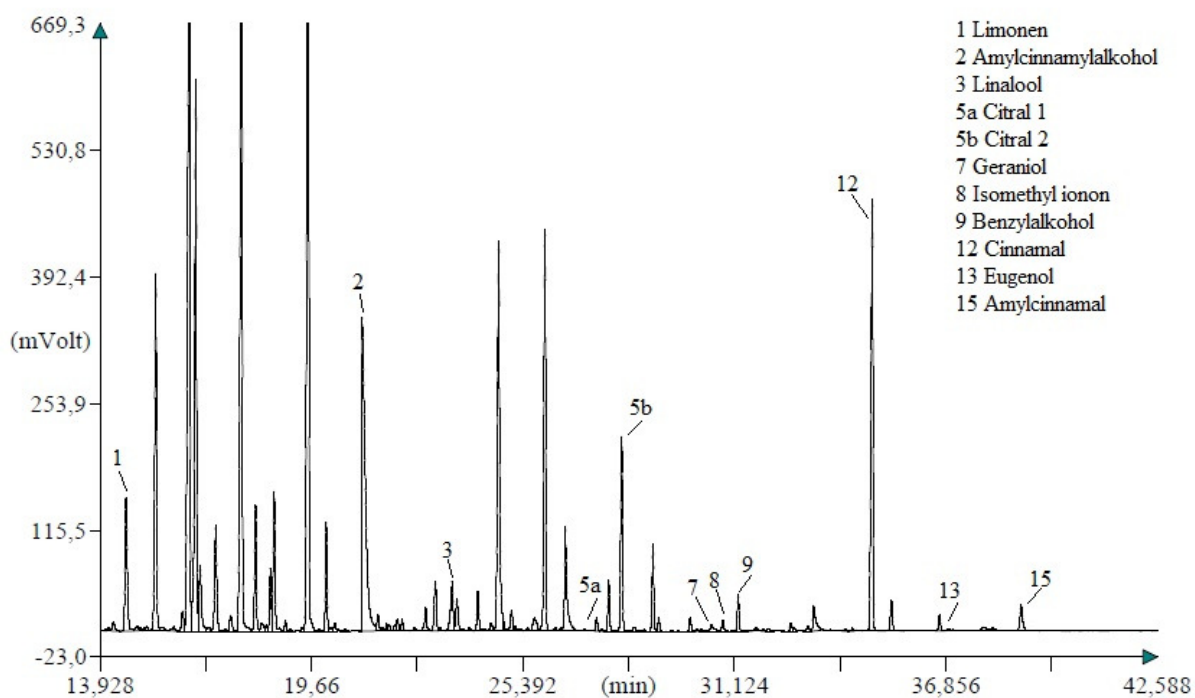
Obr. 53 Chromatogram reálného vzorku - sprchový gel K16



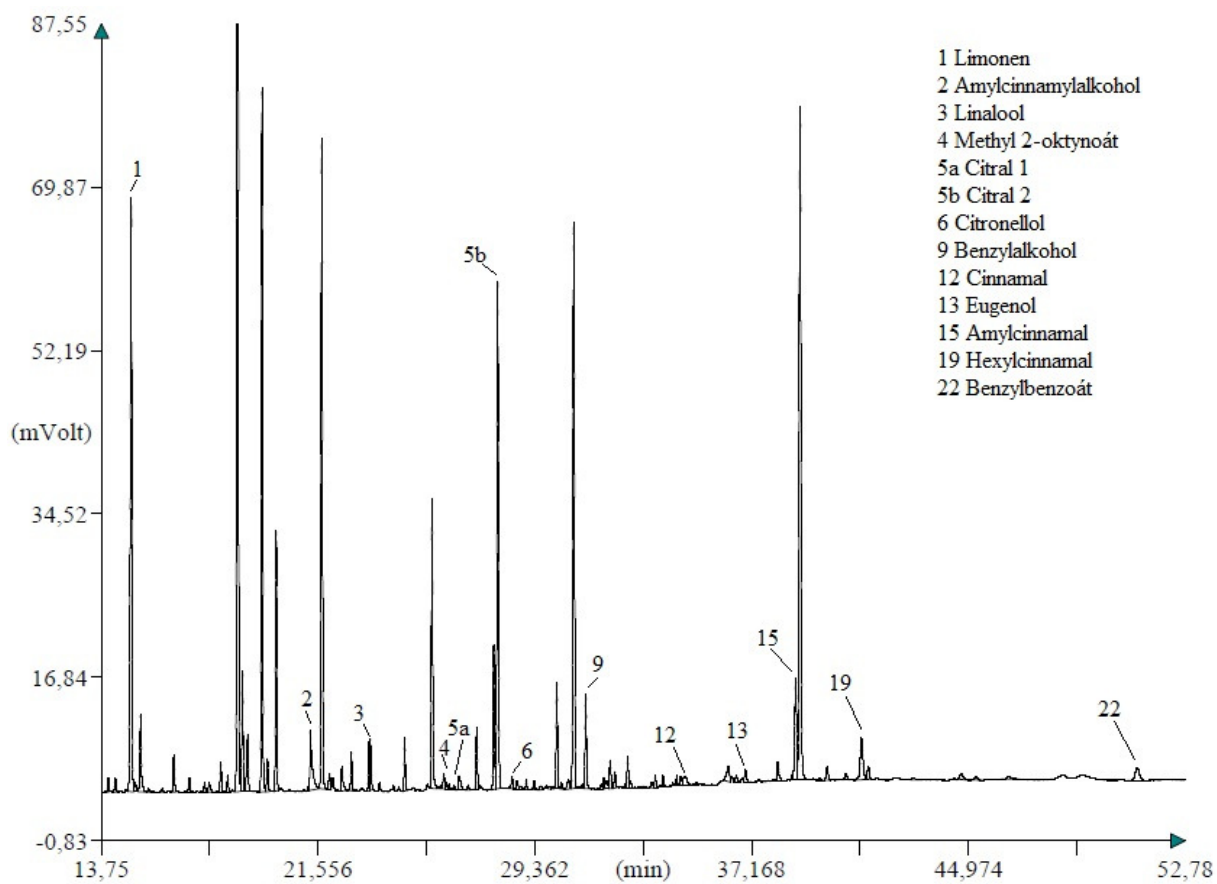
Obr. 54 Chromatogram reálného vzorku - sypaný čaj S3 (výluh)



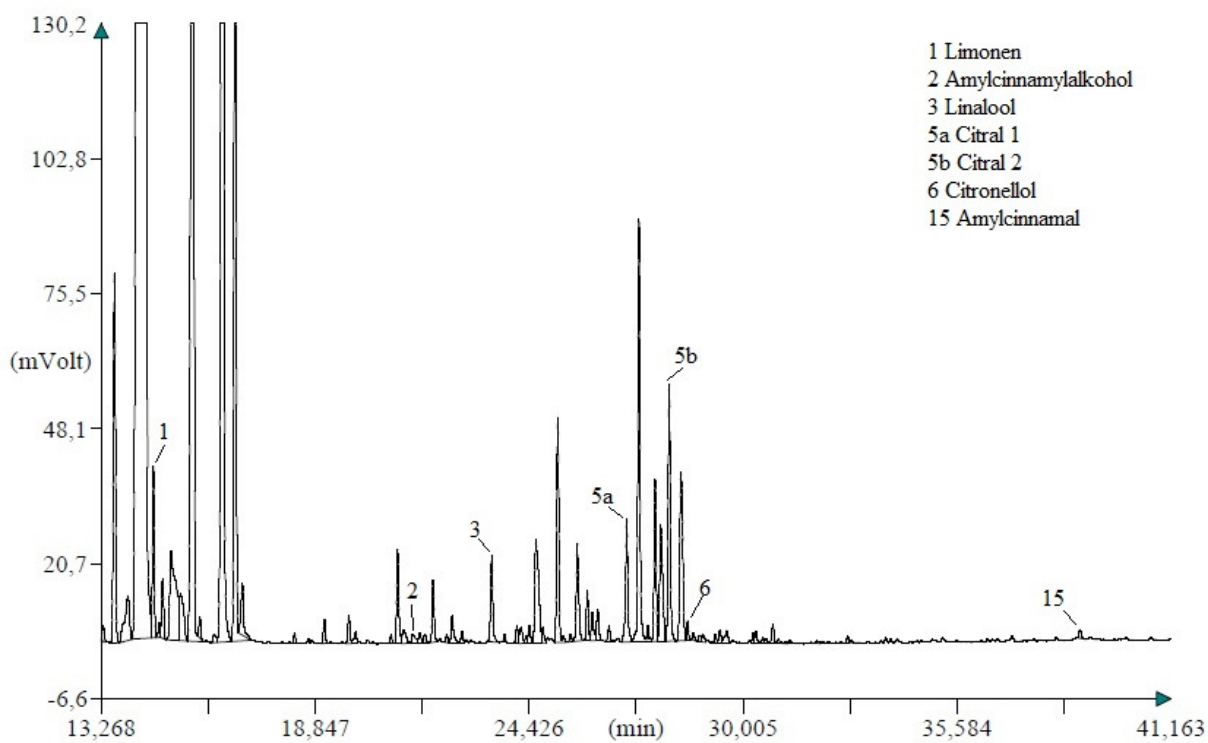
Obr. 55 Chromatogram reálného vzorku - želé bonbón B3



Obr. 56 Chromatogram reálného vzorku - žvýkáci guma G1



Obr. 57 Chromatogram reálného vzorku - nápoj N7



Obr. 58 Chromatogram reálného vzorku - porcovaný čaj P6 (výluh)

10.4 Příloha D: Dotazník pro senzorické hodnocení zubních past

Vážení hodnotitelé,
zhodnoťte, prosím, předložené vzorky zubních past.

Hodnotitel:

Datum:

Čas:

Zdravotní stav:

kuřák/nekuřák:

- Zhodnoťte předložené vzorky v následujících znacích (intenzita vůně, příjemnost vůně, intenzita chuti, příjemnost chuti) podle uvedených stupnic a svá hodnocení запиšte do přiložené tabulky.**

Kód vzorku	Intenzita vůně	Příjemnost vůně	Intenzita chuti	Příjemnost chuti

Intenzita vůně a chuti:

- 1. Neznatelná*
- 2. Velmi slabá*
- 3. Slabá*
- 4. Střední*
- 5. Silnější*
- 6. Dosti silná*
- 7. Velmi silná*

Příjemnost vůně a chuti:

- 1. Neobyčejně příjemná*
- 2. Velmi příjemná*
- 3. Příjemná*
- 4. Neutrální*
- 5. Méně příjemná*
- 6. Nepříjemná*
- 7. Nepříjemná*

- 2. Profilový test vybraných vůní - pokuste se popsat charakter vůně a případné přípachy. Posuďte, do jaké míry uvedené dílčí vůně vytvářejí celkový dojem vůně.**

Použijte stupnici:

- 1. Neznatelná*
- 2. Velmi slabá*
- 3. Slabá*
- 4. Střední*
- 5. Silnější*
- 6. Dosti silná*
- 7. Velmi silná*

Do tabulky vpisujte čísla 1-7

Označení vzorku	Charakteristická (pokuste se identifikovat)	Jiná, příjemná (uved'te jaká)	Jiná, nepříjemná (uved'te jaká)

3. Profilový test vybraných chutí - pokuste se popsat charakter chuti a případné pachuti. Posud'te, do jaké míry uvedené dílčí chutě vytvářejí celkový dojem chuti.

Do tabulky vpisujte čísla 1-7

Označení vzorku	Charakteristická (pokuste se identifikovat)	Ovocná	Sladká	Kyselá	Jiná, příjemná (uved'te jaká)	Jiná, nepříjemná (uved'te jaká)

4. Zkuste odhadnou v časových intervalech uvedených níže doznívání intenzity charakteristické (příjemné) chuti. Do tabulky vpisujte čísla 1-7.

Označení vzorku	Po 30 s (příjemná chuť)	Po 60 s (příjemná chuť)	Po 2 min (příjemná chuť)	Po 3 min (příjemná chuť)	Jiné pocity v ústech po 3 min (uved'te jaké)

5. Zkuste odhadnou v časových intervalech uvedených níže doznívání intenzity nepříjemné chuti. Do tabulky vpisujte čísla 1-7.

Označení vzorku	Po 30 s (nepříjemná chuť)	Po 60 s (nepříjemná chuť)	Po 2 min (nepříjemná chuť)	Po 3 min (nepříjemná chuť)	Jiné pocity v ústech po 3 min (uved'te jaké)

10.5 Příloha E: Dotazník pro senzorické hodnocení kosmetických výrobků

Vážení hodnotitelé,
zhodnoťte, prosím, předložené vzorky kosmetických výrobků.

Hodnotitel:

Datum:

Čas:

Zdravotní stav:

kuřák/nekuřák:

- Zhodnoťte předložené vzorky v následujících znacích (intenzita vůně, příjemnost vůně) podle uvedených stupnic a svá hodnocení zapište do přiložené tabulky.**

Kód vzorku	Intenzita vůně	Příjemnost vůně

Intenzita vůně:

- 1. Neznatelná*
- 2. Velmi slabá*
- 3. Slabá*
- 4. Střední*
- 5. Silnější*
- 6. Dosti silná*
- 7. Velmi silná*

Příjemnost vůně:

- 1. Neobyčejně příjemná*
- 2. Velmi příjemná*
- 3. Příjemná*
- 4. Neutrální*
- 5. Méně příjemná*
- 6. Nepříjemná*
- 7. Nepříjemná*

- 2. Profilový test vybraných vůní - pokuste se popsat charakter vůně a případné přípachy. Posud'te, do jaké míry uvedené dílčí vůně vytvářejí celkový dojem vůně.**

Použijte stupnici:

- 1. Neznatelná*
- 2. Velmi slabá*
- 3. Slabá*
- 4. Střední*
- 5. Silnější*
- 6. Dosti silná*
- 7. Velmi silná*

Do tabulky vpisujte čísla 1-7

Označení vzorku	Charakteristická (pokuste se identifikovat)	Jiná, příjemná (uved'te jaká)	Jiná, nepříjemná (uved'te jaká)

3. Po natření na hřbet ruky zkuste odhadnout v časových intervalech uvedených níže doznívání intenzity charakteristické vůně.

Do tabulky vpisujte čísla 1-7

Označení vzorku	Po 30 s (příjemná vůně)	Po 60 s (příjemná vůně)	Po 2 min (příjemná vůně)	Po 3 min (příjemná vůně)	Jiné pocity po 3 min (jaké - změna vůně)

10.6 Příloha F: Dotazník pro senzorické hodnocení sypaných čajových směsí

Vážení hodnotitelé, zhodnoťte, prosím, předložené vzorky čajů.

Hodnotitel:

Datum:

Čas:

Zdravotní stav:

kuřák/nekuřák:

Jaké je Vaše stanovisko před ochutnáváním:

- čaje mám velmi rád/a a často je požívám
- čaje nemám příliš rád/a, ale požívám je
- čaje nemám vůbec rád/a, dávám přednost jiným nápojům

Jak často čaje pijete?

- čaje piji velmi často (několik šáleků za den) - napište kolik
- čaje piji pouze k snídani
- čaje piji pouze při nachlazení, nemoci
- čaje piji pouze zřídka

Jaký druh čajové směsi preferujete?

- Domácí sušené ovocné směsi ANO/NE
- Ovocný čaj ANO/NE
- Černý čaj ANO/NE
- Bílý čaj ANO/NE
- Zelený čaj ANO/NE
- Bylinková čaj ANO/NE
- Jiné jaké.....

1. Zhodnoťte předložené vzorky podle uvedené stupnice a své hodnocení zapište do přiložené tabulky.

Kód vzorku	Chuť a vůně	Celkové hodnocení

Použijte uvedené hédonické stupnice:

Čuť a vůně:

1. Vynikající

- výrazná, aromatická, lahodná, harmonická chuť a vůně, celkově příjemná

2. Výborná

- výrazná, aromatická, harmonická chuť a vůně, nepatrně se odchylojící od 1, příjemná

3. Velmi dobrá

- mírné odchylky od vynikající chuti a vůně, přesto harmonická, celkově příjemná, méně výrazná

4. Dobrá

- charakteristická chuť a vůně, slabá, s odchylkami ne zásadního charakteru
- 5. *Méně dobrá*
 - velmi slabá chuť i vůně, málo typická, méně harmonická
- 6. *Nevyhovující*
 - chuť i vůně spíše nevýrazná a prázdná, příp. chuť i aroma nahořklé, trpké, spíše nepříjemné
- 7. *Nepříjemná*
 - chuť i vůně netypická pro aromatizované čaje, nevýrazná, nepříjemná, chuť výrazně trpká, silná až nesnesitelně hořká, příp. jiné vady

Celkové hodnocení:

Všimněte si celkové chutnosti čaje, hutnosti čaje, přijatelnosti chuti a vůně

1. *Vynikající vzorek*
2. *Velmi dobrý vzorek*
3. *Dobrý vzorek*
4. *Uspokojivý vzorek*
5. *Neuspokojivý vzorek*
6. *Nevyhovující vzorek*
7. *Nepříjemný vzorek*

2. Profilový test vybraných chutí - posuďte, do jaké míry uvedené dílčí chutě vytvářejí celkový dojem chutě čaje.

Použijte následující stupnici:

1. *Neznatelná*
2. *Velmi slabá*
3. *Slabá*
4. *Střední*
5. *Silnější*
6. *Dosti silná*
7. *Velmi silná*

Označení vzorku:

Typická (pokuste se identifikovat):	1	2	3	4	5	6	7
Ovocná	1	2	3	4	5	6	7
Nasládlá	1	2	3	4	5	6	7
Hořká	1	2	3	4	5	6	7
Trpká	1	2	3	4	5	6	7
Kořeněná	1	2	3	4	5	6	7
Hnilobná, po plísni	1	2	3	4	5	6	7
Bylinná	1	2	3	4	5	6	7
Jiná (uved'te jaká)	1	2	3	4	5	6	7

10.7 Příloha G: Dotazník pro senzorické hodnocení porcovaných čajových směsí a žvýkacích gum

Vážení hodnotitelé,
zhodnoťte, prosím, předložené vzorky čajů popř. žvýkacích gum.

Hodnotitel:

Datum:

Čas:

Zdravotní stav: kuřák/nekuřák:

Jaké je Vaše stanovisko před ochutnáváním?

- Čaje: Ovocné aromatizované čaje mám velmi rád/a
Ovocné aromatizované čaje nemám příliš rád/a
Ovocné aromatizované čaje nemám vůbec rád/a
- Žvýkací gummy: Ovocné žvýkačky mám velmi rád/a
Ovocné žvýkačky nemám příliš rád/a
Ovocné žvýkačky nemám vůbec rád/a

- 1. Zhodnoťte předložené vzorky v následujících znacích (intenzita vůně, příjemnost vůně, intenzita chuti, příjemnost chuti) podle uvedených stupnic a svá hodnocení zapište do přiložené tabulky.**

Kód vzorku	Intenzita vůně	Příjemnost vůně	Intenzita chuti	Příjemnost chuti

Intenzita vůně a chuti:

1. *Neznatelná*
2. *Velmi slabá*
3. *Slabá*
4. *Střední*
5. *Silnější*
6. *Dosti silná*
7. *Velmi silná*

Příjemnost vůně a chuti:

1. *Vynikající* - výrazná, charakteristická, aromatická, lahodná, harmonická
2. *Výborná* - výrazná, charakteristická, aromatická, harmonická, nepatrně se odchylující od stupně 1
3. *Velmi dobrá* - mírné odchylky od stupně „Vynikající“, přesto harmonická, méně výrazná
4. *Dobrá* - charakteristická, větší odchylky od stupně „Vynikající“ ne zásadního charakteru
5. *Méně dobrá* - málo typická, méně harmonická
6. *Nevyhovující* - nevýrazná, prázdná, neutrální
7. *Nepříjemný* - nepříjemná, netypická, výrazně negativní přípach (pachut')

2. Profilový test vybraných vůní - posuďte, do jaké míry uvedené dílčí vůně vytvářejí celkový dojem vůně.

Použijte stupnici:

1. *Neznatelná*
2. *Velmi slabá*
3. *Slabá*
4. *Střední*
5. *Silnější*
6. *Dosti silná*
7. *Velmi silná*

Do tabulky vpisujte čísla 1-7

Označení vzorku	Charakteristická (pokuste se identifikovat použité ovoce)	Ovocná	Sladká	Kyselá	Jiná, příjemná (uved'te jaká)	Jiná, nepříjemná (uved'te jaká)

3. Profilový test vybraných chutí - posuďte, do jaké míry uvedené dílčí chutě vytvářejí celkový dojem chutě

Použijte stupnici:

1. *Neznatelná*
2. *Velmi slabá*
3. *Slabá*
4. *Střední*
5. *Silnější*
6. *Dosti silná*
7. *Velmi silná*

Do tabulky vpisujte čísla 1-7

Označení vzorku	Charakteristická (pokuste se identifikovat použité ovoce)	Ovocná	Sladká	Kyselá	Jiná, příjemná (uved'te jaká)	Jiná, nepříjemná (uved'te jaká)

4. Z kuste odhadnou v časových intervalech uvedených níže dozrívání intenzity charakteristické (příjemné) chuti. Do tabulky vpisujte čísla 1-7 (jen pro žvýkačky).

Označení vzorku	Po 30 s (příjemná chuť)	Po 60 s (příjemná chuť)	Po 2 min (příjemná chuť)	Po 3 min (příjemná chuť)	Jiné pocity v ústech po 3 min (uveďte jaké)

5. Z kuste odhadnou v časových intervalech uvedených níže doznívání intenzity nepříjemné chuti. Do tabulky vpisujte čísla 1-7 (jen pro žvýkačky).

Označení vzorku	Po 30 s (nepříjemná chuť)	Po 60 s (nepříjemná chuť)	Po 2 min (nepříjemná chuť)	Po 3 min (nepříjemná chuť)	Jiné pocity v ústech po 3 min (uveďte jaké)

10.8 Příloha H: Dotazník pro senzorycké hodnocení želatinových bonbónů a ovocných aromatizovaných alkoholických a nealkoholických nápojů

Vážení hodnotitelé,
zhodnoťte, prosím, předložené vzorky želatinových bonbónů popř. nápojů

Hodnotitel:

Datum:

Čas:

Zdravotní stav:

kuřák/nekuřák:

Jaké je Vaše stanovisko před ochutnáváním?

- želatinové bonbóny (ovocné alkoholické a nealkoholické nápoje) mám velmi rád/a
- želatinové bonbóny (ovocné alkoholické a nealkoholické nápoje) nemám příliš rád/a
- želatinové bonbóny (ovocné alkoholické a nealkoholické nápoje) nemám vůbec rád/a

1. Zhodnoťte předložené vzorky v následujících znacích (intenzita vůně, příjemnost vůně, intenzita chutě, příjemnost chutě) podle uvedených stupnic a svá hodnocení zapište do tabulky.

Kód vzorku	Intenzita vůně	Příjemnost vůně	Intenzita chutě	Příjemnost chutě

Intenzita vůně a chutě:

1. *Neznatelná*
2. *Velmi slabá*
3. *Slabá*
4. *Střední*
5. *Silnější*
6. *Dosti silná*
7. *Velmi silná*

Příjemnost vůně a chutě:

1. *Vynikající*
 - výrazná, charakteristická, aromatická, lahodná, harmonická
2. *Výborná*
 - výrazná, charakteristická, aromatická, harmonická, nepatrně se odchylojící od 1
3. *Velmi dobrá*
 - mírné odchylky od stupně „Vynikající“, přesto harmonická, méně výrazná
4. *Dobrá*
 - charakteristická, větší odchylky od stupně „Vynikající“ ne zásadního charakteru
5. *Méně dobrá*
 - málo typická, méně harmonická
6. *Nevyhovující*
 - nevýrazná, prázdná, neutrální

7. *Nepřijatelná*

- nepříjemná, netypická, výrazně negativní přípach (pachut')

2. Profilový test vybraných vůní - posuďte, do jaké míry uvedené dílčí vůně vytvářejí celkový dojem vůně. Použijte stupnici.

1. *Neznatelná*
2. *Velmi slabá*
3. *Slabá*
4. *Střední*
5. *Silnější*
6. *Dosti silná*
7. *Velmi silná*

Kód vzorku	Ovocná	Sladká	Kyselá	Jiná příjemná (uved'te jaká)	Jiná nepříjemná (uved'te jaká)

3. Profilový test vybraných chutí - posuďte, do jaké míry uvedené dílčí chutě vytvářejí celkový dojem chuti. Použijte stupnici z úkolu 2.

Kód vzorku	Charakteristická (uved'te jaká)	Ovocná	Sladká	Kyselá	Umělá, po plastech	Jiná, příjemná (uved'te jaká)	Jiná nepříjemná (uved'te jaká)

4. Zkuste odhadnout v časových intervalech uvedených níže doznívání charakteristické příjemné chuti

Do tabulky vpisujte čísla 1-7

Označení vzorku	Po 30 s	Po 60 s	Po 2 min	Po 3 min	Jiné pocity po 3 min (jaké)

5. Zkuste odhadnout v časových intervalech uvedených níže doznívání charakteristické nepříjemné chuti

Do tabulky vpisujte čísla 1-7

Označení vzorku	Po 30 s	Po 60 s	Po 2 min	Po 3 min	Jiné pocity po 3 min (jaké)

10.9 Životopis autora

Jméno a příjmení: Radka Divišová (roz. Mokáňová)
Trvalé bydliště: Chelčického 18, 747 05 Opava
Kontaktní adresa: Hvozdecká 19, 635 00 Brno
Datum narození: 02.09.1985
Národnost: česká

Vzdělání

2009 – současnost

Doktorské studium, program Chemie a technologie potravin, obor Potravinářská chemie.
Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická.

Téma disertační práce: Alergenní vonné látky v potravinách a předmětech běžného používání

2007 – 2009

Navazující magisterské studium, program Spotřební chemie, obor Spotřební chemie
Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická.,

Téma diplomové práce: Analýza vonných látek v kosmetických prostředcích metodou plynové chromatografie

2004 – 2007

Bakalářské studium, program Chemie a chemické technologie, obor Spotřební chemie
Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická

Téma bakalářské práce: Vonné látky živočišného původu a jejich alternativy při použití v kosmetickém průmyslu

Zahraniční stáž Erasmus

Zahraniční studijní pobyt v rámci Erasmu - praxe vykonávaná na univerzitě.

Univerzita: Vrije Universiteit Brussel, Pleinlaan 2, 1050, Brussels, Belgium

Délka pobytu: 3 měsíce, září – prosinec 2011

Pedagogická činnost

2009 – 2010

Praktikum z instrumentální a strukturní analýzy

Praktikum ze senzorické analýzy

Účast na projektech

2012

Spoluřešitel projektu FRVŠ: Chemická, mikrobiologická a senzorická charakterizace tavených sýrů (01.01.2012 - 31.12.2012).

2011

Řešitel projektu FRVŠ: Stanovení alergenních vonných látek v potravinách a kosmetických výrobcích (01.01.2011 – 31.12.2011).

Projekt specifického výzkumu FCH VUT v Brně: Modernizace postupů kontroly a přípravy technologických postupů při výrobě potravin, potravinových doplňků a využití odpadů z potravinářských výrob (01.01.2011 - 31.12.2011)

2010

Projekt specifického výzkumu FCH VUT v Brně: Studium potravin a potravinových doplňků z pohledu zvýšení jejich bezpečnosti, zdraví prospěšnosti, autentičnosti a využití odpadů, které vznikají při zpracování surovin pro potravinářské účely (01.01.2010 – 31.12.2010)

Účast na konferencích

DIVIŠOVÁ, R.; ZEMANOVÁ, J.; VÍTOVÁ, E.; SKLENÁŘOVÁ, K. Stanovení alergenních vonných látek metodou mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií. *Chemické listy*. Olomouc, ČSCH. 2012. 106(6). p. 503 - 503. ISSN 0009-2770.

VÍTOVÁ, E.; DIVIŠOVÁ, R.; SKLENÁŘOVÁ, K. Aromatický profil plodů angreštu (*Ribes grossularia* L.). *Chemické listy*. Olomouc, ČSCH. 2012. 106(6). p. 569 - 569. ISSN 0009-2770.

VÍTOVÁ, E.; DIVIŠOVÁ, R.; SKLENÁŘOVÁ, K.; OMELKOVÁ, J.; ZEMANOVÁ, J. Obsah aromaticky aktivních látek v plodech rakytníku řešetlákového (*Hippophae rhamnoides* L.). In *Sborník prací z mezinárodní vědecké konference Bezpečnost a kontrola potravin*. SPU v Nitre. 2012. p. 262 - 265. ISBN 978-80-552-0769-8.

DIVIŠOVÁ, R.; VÍTOVÁ, E.; LOUPANCOVÁ, B.; SKLENÁŘOVÁ, K.; BABÁK, L. *Use of descriptive sensory methods for evaluation of various types of foods*. *Chemické listy*. Brno: ČSCH, 2011. s. s1010 (s1010 s.) ISSN: 0009- 2770.

DIVIŠOVÁ, R.; VÍTOVÁ, E.; ZEMANOVÁ, J.; LOUPANCOVÁ, B.; SKLENÁŘOVÁ, K. *Optimization and validation of SPME-GC-FID method for determination of suspected allergens in selected cosmetics and food samples*. *Chemické listy*. Brno: ČSCH, 2011. s. s1009 (s1010 s.) ISSN: 0009- 2770.

VÍTOVÁ, E.; VESPALCOVÁ, M.; OMELKOVÁ, J.; DIVIŠOVÁ, R.; SKLENÁŘOVÁ, K. Obsah aromaticky aktivních látek ve šťávě z bezu černého (*Sambucus nigra* L.). In *Sborník prací z mezinárodní vědecké konference Bezpečnost a kontrola potravin*. SPU v Nitre. Nitra: 2011. s. 257-260. ISBN: 978-80-552-0559- 5.

VÍTOVÁ, E.; LOUPANCOVÁ, B.; DIVIŠOVÁ, R.; SKLENÁŘOVÁ, K.; BABÁK, L. *The content of lactic acid bacteria in chosen probiotic foods*. *Chemické listy*. Brno: ČSCH, 2011. s. s1032 (s1033 s.) ISSN: 0009- 2770.

SKLENÁŘOVÁ, K.; VÍTOVÁ, E.; DIVIŠOVÁ, R.; LOUPANCOVÁ, B. *Aroma active compounds in several types of processed cheese analogues*. Chemické listy. Brno: ČSCH, 2011. s. s1044 (s1044 s.) ISSN: 0009- 2770.

SKLENÁŘOVÁ, K.; LOUPANCOVÁ, B.; DIVIŠOVÁ, R.; VÍTOVÁ, E.; BABÁK, L. *The content of aroma compounds in fermented milk products*. Chemické listy. Brno: ČSCH, 2011. s. s1044 (s1044 s.) ISSN: 0009- 2770.

VÍTOVÁ, E.; LOUPANCOVÁ, B.; DIVIŠOVÁ, R.; SKLENÁŘOVÁ, K.; FIŠERA, M. *Relationship between volatile compounds content and sensory attributes of sterilized processed cheese*. Chemické listy. Brno: ČSCH, 2011. s. s1032 (s1032 s.) ISSN: 0009- 2770.

VÍTOVÁ, E.; VESPALCOVÁ, M.; LOUPANCOVÁ, B.; DIVIŠOVÁ, R.; SKLENÁŘOVÁ, K. *The comparison of content of aroma active compounds in samples of elder berries (Sambucus nigra L.)*. Chemické listy. Brno: ČSCH, 2011. s. s1031 (s1032 s.) ISSN: 0009- 2770.

VÍTOVÁ, E.; VESPALCOVÁ, M.; OMELKOVÁ, J.; HÝSKOVÁ, E.; MOKÁŇOVÁ, R. *Vliv technologie výroby na chutnost sýrů eidamského typu*. In *Sborník prací z mezinárodní vědecké konference Bezpečnost a kontrola potravin*. SPU v Nitre. Nitra: Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, 2010. s. 190-193. ISBN: 978-80-552-0350- 8.

HÝSKOVÁ, E.; ZEMANOVÁ, J.; MOKÁŇOVÁ, R.; VÍTOVÁ, E. *Identifikace senzorycky aktivních látek v bezu černém (Sambucus nigra)*. Chemické listy. Chemické listy. Pardubice: ČSCH, 2010. s. 574-574. ISSN: 0009- 2770.

VÍTOVÁ, E.; HÝSKOVÁ, E.; MOKÁŇOVÁ, R.; ZEMANOVÁ, J. *Složení mastných kyselin tavených sýrových analogů*. Chemické listy. Chemické listy. Pardubice: ČSCH, 2010. s. 579-579. ISSN: 0009- 2770.

VÍTOVÁ, E.; HÝSKOVÁ, E.; MOKÁŇOVÁ, R.; ZEMANOVÁ, J. *Změny chutnosti sýrů eidamského typu během zrání*. Chemické listy. Chemické listy (S). Brno: Chemické listy, 2010. s. 782-783. ISSN: 1803- 2389.

VÍTOVÁ, E.; ZEMANOVÁ, J.; MOKÁŇOVÁ, R.; JELÍNKOVÁ, M. *The determination of aroma compounds of plant origin*. In *The abstract book*. UTB Zlín: UTB Zlín, 2009. s. 181-181. ISBN: 978-80-7318-809- 2.

Publikace v časopisech

DIVIŠOVÁ, R., VÍTOVÁ, E., DIVIŠ, P., ZEMANOVÁ, J., OMELKOVÁ, J. *Validation of SPME-GC-FID method for determination of fragrance allergens in selected cosmetic products*. *Acta Chromatographica*, 2015, issue 3 (v tisku)

VÍTOVÁ, E.; DIVIŠOVÁ, R.; SŮKALOVÁ, K.; MATĚJÍČEK, A. Determination and quantification of volatile compounds in selected elderberry cultivars grown in Czech Republic. *Journal of Food and Nutrition Research*, 2013, vol. 52, no. 1, pp. 1-11. ISSN 1336-8672.

VÍTOVÁ, E.; DIVIŠOVÁ, R.; BABÁK, L.; ZEMANOVÁ, J.; SKLENÁŘOVÁ, K. The changes of flavour during production of Edam cheese. *Acta Universitatis Agriculturae et Silviculturae Mendelianae Brunensis*, 2011, roč. 59, č. 1, s. 255-261. ISSN: 1211- 8516.

VÍTOVÁ, E.; BABÁK, L.; MOKÁŇOVÁ, R.; HÝSKOVÁ, E.; ZEMANOVÁ, J. The content of sensory active compounds and flavour of several types of yogurts. *Acta Universitatis Agriculturae et Silviculturae Mendelianae Brunensis*, 2010, roč. 58, č. 5, s. 407-412. ISSN: 1211- 8516.