

Česká zemědělská univerzita v Praze
Fakulta agrobiologie, potravinových a přírodních zdrojů

Katedra kvality a bezpečnosti potravin



**Fakulta agrobiologie,
potravinových a přírodních zdrojů**

**Vztah parametrů pekařské kvality pšenice
a metabolitů v ^1H NMR spektru**

Diplomová práce

Autor práce: Bc. Anna Tomšů
Studijní program: Výživa a potraviny

Vedoucí práce: Ing. et Ing. Lucie Jurkaninová, Ph.D.
Konzultant: Ing. Karolína Němcová

© 2024 ČZU v Praze

Čestné prohlášení

Prohlašuji, že svou diplomovou práci "Vztah parametrů pekařské kvality pšenice a metabolitů v ^1H NMR spektru" jsem vypracovala samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce. Jako autorka uvedené diplomové práce dále prohlašuji, že jsem v souvislosti s jejím vytvořením neporušila autorská práva třetích osob.

V Praze dne 21.4.2024

Poděkování

Ráda bych touto cestou poděkovala vedoucí práce Ing. et Ing. Lucii Jurkaninové, Ph.D., konzultantce Ing. Karolíně Němcové a Anně Mascellani Bergo, Ph.D. za odborné vedení práce.

Vztah parametrů pekařské kvality pšenice a metabolitů v ^1H NMR spektru

Souhrn

Diplomová práce se zaměřuje na analýzu vztahu mezi pekařskou kvalitou pšenice a jejími metabolickými profily, zjištěnými pomocí ^1H NMR spektroskopie. Práce představuje přehled současných znalostí o složení a vlastnostech pšenice, včetně jejího významu pro lidskou stravu a zemědělství. Zvláštní důraz je kladen na porovnání tradičních a moderních odrůd pšenice v rámci jejich biochemických charakteristik, které mohou ovlivnit pekařskou kvalitu.

V experimentální části byla analyzována kvalita různých odrůd pšenice z ekologického a konvenčního zemědělství. Byly zpracovány vzorky získané z výzkumné stanice, které byly analyzovány na obsah klíčových metabolitů, jako jsou leucin, acetát a asparagin, které mají přímý vliv na pekařské vlastnosti pšenice.

Výsledky ukazují, že metabolický profil pšenice může sloužit jako spolehlivý indikátor její kvality. Zvláštní pozornost byla věnována vlivu různých pěstebních praxí na tyto profily, přičemž bylo zjištěno, že ekologicky pěstované odrůdy často vykazují lepší nutriční a pekařské vlastnosti.

Z práce plyne, že detailní pochopení metabolického spektra pšenice může být klíčový k efektivnějšímu šlechtění nových odrůd, které by byly optimalizované pro specifické využití v pekařství. Práce tak přináší nový pohled na možnosti využití ^1H NMR spektroskopie v agronomii a potravinářství a zdůrazňuje potřebu dalšího výzkumu v této oblasti, zejména v kontextu stoupajících nároků na kvalitu a bezpečnost potravin.

Klíčová slova: pekařská kvalita, aminokyseliny, ^1H NMR, nutriční kvalita, falšování

Relation of bakery quality parameters of wheat and metabolites in ^1H NMR spectrum

Summary

This thesis focuses on the analysis of the relationship between the baking quality of wheat and its metabolic profiles as determined by ^1H NMR spectroscopy. The thesis presents an overview of the current knowledge on the composition and properties of wheat, including its importance for human nutrition and agriculture. Particular emphasis is placed on the comparison of traditional and modern wheat varieties in terms of their biochemical characteristics that may affect baking quality.

In the experimental part, the quality of different wheat varieties from organic and conventional farming was analysed. Samples obtained from the research station were analysed for the content of key metabolites such as leucine, acetate and asparagine, which have a direct influence on the baking properties of wheat.

Results show that the metabolic profile of wheat can serve as a reliable indicator of its quality. Particular attention was paid to the influence of different cultivation practices on these profiles, and it was found that organically grown varieties often show better nutritional and baking properties.

The work suggests that a detailed understanding of the metabolic spectrum of wheat may be key to more effective breeding of new varieties optimized for specific uses in bakery. The work thus provides a new perspective on the potential applications of ^1H NMR spectroscopy in agronomy and food science and highlights the need for further research in this area, especially in the context of increasing demands on food quality and safety.

Keywords: baking quality, amino acids, ^1H NMR, nutritional quality, counterfeiting

Obsah

1 Úvod	7
2 Vědecká hypotéza a cíle práce.....	8
3 Literární rešerše	9
3.1 Pšenice setá	9
3.2 Pšenice špalda.....	15
3.3 Jakostní ukazatele potravinářské pšenice.....	21
3.4 Reologie	23
3.5 ^1H NMR.....	24
4 Metodika.....	26
4.1 Charakteristika vybraných odrůd.....	26
4.2 Analytické rozbory.....	30
4.3 ^1H NMR.....	33
5 Výsledky	35
5.1 Analytické hodnocení pšenice	35
5.2 Reologické vlastnosti.....	45
5.3 ^1H NMR.....	50
5.4 Statistická analýza.....	52
6 Diskuse.....	58
7 Závěr.....	62
8 Literatura	63
9 Seznam použitých zkratk a symbolů	73
10 Seznam tabulek.....	74
11 Seznam obrázků	75

1 Úvod

Diplomová práce se zaměřuje na vztah mezi pekařskou kvalitou pšenice a metabolity identifikovanými pomocí techniky ^1H NMR spektroskopie. Pšenice, jako jedna z nejstarších a nejdůležitějších zemědělských plodin, pokrývá více půdy než jakákoli jiná plodina a je základní složkou lidské stravy na celém světě. S rostoucími nároky na kvalitu potravin a stoupajícím zájmem o detailní analýzu potravinových produktů je stále důležitější pochopení molekulárních mechanismů, které určují kvalitu pšenice.

Produkce a kvalita pšenice jsou významně ovlivněny mnoha faktory, včetně genetiky, pěstebních technik, klimatických podmínek a posklizňového zpracování. Moderní technologie jako je ^1H NMR spektroskopie umožňují analyzovat malé molekuly neboli metabolity v různých vzorcích pšenice, což může poskytnout přesnější informace o jejich potenciální kvalitě a zdravotních výhodách.

Pekařská kvalita pšenice je zásadním parametrem, který ovlivňuje vše od textury a chuti pečiva až po jeho nutriční hodnotu. Ačkoli byla většina předchozích studií zaměřena převážně na proteiny a škroby, tento výzkum přináší nový pohled na metabolický profil pšenice a jeho vztah k pekařským vlastnostem.

V rámci práce jsou zkoumány vzorky pšenice různých odrůd a pěstebních podmínek, což umožňuje srovnat, jak různé genetické a environmentální faktory ovlivňují metabolické složení zrna. Pochopení těchto vztahů může vést k lepším strategiím šlechtění a pěstování, které by mohly zlepšit pekařskou kvalitu pšenice a zároveň zachovat nebo dokonce zvýšit její nutriční hodnotu.

2 Vědecká hypotéza a cíle práce

Cílem práce je otestovat možnosti využití ^1H NMR profilu spektra pro predikci pekařské kvality obilovin a mlýnských výrobků.

Hypotéza: Na základě ^1H NMR profilu spektra je možné predikovat pekařskou kvalitu obilovin a mlýnských výrobků.

3 Literární rešerše

Pšenice (*Triticum aestivum* L.) je řazena mezi jedny z nejstarších plodin a zároveň tvoří jednu z nejdůležitějších základních potravin lidstva. Pokrývá více zemědělské půdy, než jakákoli jiná potravinářská plodina na světě (Lamba et al. 2023). Celosvětová produkce v roce 2021 byla cca 771 milionů tun (Huertas-García et al. 2023). Největšími světovými producenty jsou Čína, USA a Indie. Zatímco největšími evropskými producenty jsou Francie, Německo a Rumunsko (Bacher et al. 2023).

Její domestikace znamenala přechod od lovu a sběru k agrární ekonomice v Asii. Díky tomuto významu se jejímu původu a evoluci věnovala značná pozornost. Existuje šest biologických druhů pšenice, které jsou vedeny na třech úrovních ploidie. Jsou jimi diploidní (*Triticum monococcum* a *Triticum urartu*), tetraploidní (*T. durum*, *T. turgidum* a *T. timopheevii*) a hexaploidní pšenice (*T. spelta*, *T. aestivum* a *T. zhukovskyi*) (Chantret et al. 2005; Dvorak et al. 2012; Mastrangelo & Cattivelli 2021).

Přibližně 1/3 světové populace závisí na produkci pšenice, pokud jde o krmiva a potraviny. Proto změna klimatu a rostoucí celosvětová populace představují hrozbu pro zajišťování potravin. Je tedy vhodné hledat alternativní plodiny, které nejsou tolik náročné na množství srážek (Lamba et al. 2023).

3.1 Pšenice setá

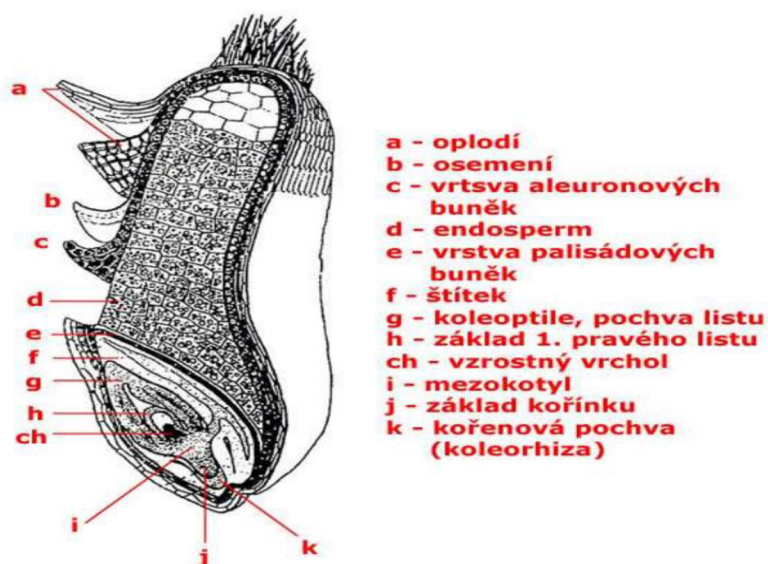
V České republice má pšenice setá ozimá (*Triticum aestivum* L.) dominantní postavení v rámci obilovin i ostatních plodin pěstovaných na orné půdě, kde zaujímá cca 30 % plochy. Dochází ovšem k meziročnímu kolísání osevních ploch (Prugar et al. 2008). Ozimé obiloviny v České republice byly v roce 2022 vysety na 972 tis. ha tj. meziročně o 86 tis. ha více. Zásadní podíl na nárůstu ploch ozimých obilovin má pšenice, jejíž plocha 788 tis. ha je meziročně větší o 79 tis. ha (+ 11,1 %). Nárůst byl zaznamenán i u ječmene. Plocha 123 tis. ha je větší o 12 tis. ha (+ 10,4 %). Naopak úbytek ploch byl zaznamenán u žita o 2 tis. ha na 23. tis. ha (−7 %) a triticales o 3 tis. ha na 38 tis. ha (− 6,1 %) (ČSÚ 2022).

Již několik tisíc let je pšenice a pšeničný chléb jednou z hlavních složek lidské stravy, díky tomu je pečení kynutých a kváskových chlebů jedním z nejstarších biotechnologických procesů. Pšeničná mouka je složena především ze škrobu (70–75 %), vody (cca 14 %) a proteinů (10–12 %). Vedlejšími složkami mouky, které jsou také důležité pro výrobu a kvalitu chleba, jsou neškrobové polysacharidy (2–3 %), zejména arabinoxylany a lipidy (2 %) (Goesaert et al. 2005).

3.1.1 Látkové a morfologické složení pšeničného zrna

Složení obilky je variabilní v závislosti na anatomické stavbě dané odrůdy a na půdních a klimatických podmínkách. Dále v závislosti na použité agrotechnice, výživě rostliny a významnou roli hraje mnoho dalších činitelů (Prugar et al. 2008). Pšenice setá sdílí mnoho morfologických i chemických vlastností s jinými druhy pšenice, které se komerčně využívají. Hlavním morfologickým znakem zrna je oválný tvar, přítomnost klíčku a vousku. Obrázek 1 znázorňuje strukturu pšeničné obilky. Pšeničná zrna jsou komplexní struktury, které se skládají z následujících částí: 2–3 % hmotnosti tvoří klíčky, 13–17 % připadá na otruby (složené z pokožky, příčných buněk a hadicových buněk), a většinu objemu,

konkrétně 80–85 %, tvoří endosperm neboli jádro zrna. Pod otrubami se nachází aleuronová vrstva, která se vyskytuje v jedné nebo více souvislých vrstvách podle stupně zralosti. Aleuronová vrstva má relativně vysoký obsah popela, proteinů, celkového fosforu, lipidů a také niacinu. Mezi další vitaminy vyskytující se v aleuronové vrstvě se řadí thiamin a riboflavin. Jejich koncentrace v této vrstvě je vyšší než v ostatních částech otrub. Tato vrstva je také bohatá na enzymy, které se podílejí na klíčení zrna. Většina aleuronové vrstvy je ale odstraněna jako součást otrub během válcového mletí zrna (Arendt & Zannini 2013).



Obrázek 1 Struktura pšeničné obilky (Arendt & Zannini 2013)

Klíček leží na spodní straně obilky. Obsahuje relativně vysoký podíl proteinů (25 %), sacharidů (18 %), zejména sacharosy a rafinosy, a popela (5 %). Klíček se vyznačuje především nejvyšší koncentrací lipidů (16 %), a tudíž v těchto rozpustných vitamínů E s koncentrací až 500 ppm (Delcour & Hosney 2010). Má také nejvyšší obsah vlhkosti mezi složkami zralého pšeničného zrna. Použití klíčků je ovšem náročné vzhledem k jejich špatné stabilitě a přítomnosti antinutričních látek, mezi které lze zařadit rafinosu. Ta není trávena pankreatickými enzymy, ale je metabolizována bakteriemi tlustého střeva. Ty mohou produkovat nežádoucí plyny a způsobovat potíže jako je flatulence (Rizzello et al. 2010). Další antinutriční látkou v klíčku je fytová kyselina, která výrazně snižuje biologickou dostupnost minerálních látek (Arendt & Zannini 2013).

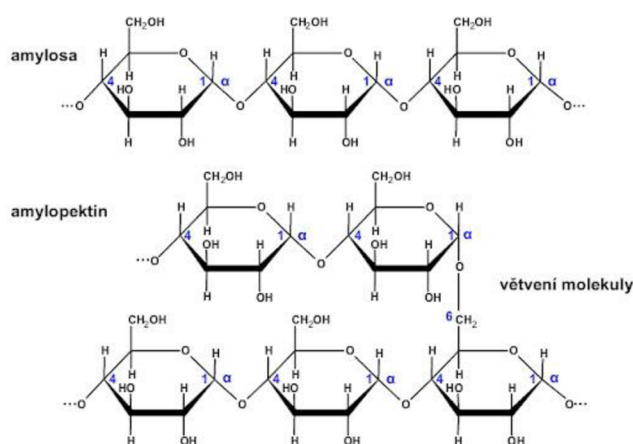
Největší morfologickou částí zrna je škrobový endosperm. V závislosti na typu odrůdy a agroekologických podmínkách, může být obsah škrobu v zrna pšenice mezi 50–70 %. Když se škrobová zrna namočí do vody a zahřejí na teplotu v rozmezí 55–70 °C, začnou bobtnat a jejich viskozita rychle roste. Zrna se nafouknou a nakonec prasknou, přičemž se uvolní silně viskózní roztok známý jako škrobový maz. Tento proces je klíčový při výrobě pečiva. (Prugar et al. 2008).

Další důležitou složkou endospermu jsou proteiny, které zde tvoří cca 15 % obsahu. Škrob a proteiny tedy tvoří dvě hlavní části endospermu zrna. Zásobním proteinem pšenice je lepek (Arendt & Zannini 2013).

3.1.1.1 Sacharidy

Nejpodstatnější složkou pšeničného zrna jsou sacharidy. Jedná se především o polysacharidy jako je škrob, celulóza, hemicelulóza a pentosany. Dále se v zrně nacházejí oligosacharidy, monosacharidy, a také sacharidy, které tvoří součásti komplexů s lipidy a proteiny – glykolipidy a glykoproteiny (Prugar et al. 2008).

Škrob je složen ze dvou polysacharidů, a to z amylosy s přímým řetězcem glukosových zbytků a z amylopektinu. Amylopektin má rozvětvený řetězec, v němž se kromě vazeb mezi uhlíky 1,4 vyskytují také vazby 1,6, a proto lépe odolává amylolytickým enzymům než molekula amylosy. Strukturální vzorce jsou znázorněny na obrázku 2. Kromě těchto polysacharidů obsahuje škrob minerální látky (hlavně kyselinu fosforečnou) a vyšší mastné kyseliny (Shevkani et al. 2024).



Obrázek 2 Strukturální vzorce amylosy a amylopektinu

Čistý pšeničný škrob je složen ze zrn různé velikosti a tvaru. Pšeničná škrobová zrna tvoří dvě významné velikostní frakce. Velká zrna, označovaná jako škrob „A“, mají velikosti částic od 10–15 μm do 50 μm . Malá zrna, nazývaná škrob „B“, mají velikosti menší než 10–15 μm . Škrob „B“ je pevně fixován na proteinovou matici, je tedy špatně oddělitelný, a snižuje tak nejen kvalitu lepku, ale i výtěžnost škrobu. Navíc byl v této frakci zjištěn podstatně vyšší podíl dusíku, než ve škrobu „A“. Velká škrobová zrna obsahují vyšší podíl amylosy, jsou snadněji degradovatelná α -amylasou a k jejich zmazování dochází při nižších teplotách, než je tomu u malých škrobových zrn (Shi et al. 2024).

3.1.1.2 Proteiny

Obilná zrna (včetně pšenice) se vyznačují nižším obsahem proteinů ve srovnání s luštěninami (35–40 %) a olejninami (20–35 %). Jejich množství kolísá ve velkém rozpětí. V meteorologicky normálním roce obsahuje zrna okolo 12–13 % proteinů v sušině. Podle různých údajů je zastoupení osmi esenciálních aminokyselin v sušině následující: leucin 0,8 %, isoleucin 0,8 %, valin 0,5 %, fenylalanin 0,5 %, lysin 0,4 %, threonin 0,3 %, methionin 0,2 % a tryptofan 0,2 %. Nejvíce proteinů je obsaženo v aleuronové vrstvě a klíčku. V endospermu ubývá proteinů směrem do středu. Tyto proteiny přecházejí do mouky a jsou hlavními nositeli technologických vlastností. Variabilita v obsahu proteinů je mimo jiné

dána i zemědělskými postupy, včetně používání dusíkatých hnojiv (Szuba-Trznadel et al. 2024). Mezi limitní aminokyselinu v pšeničném proteinu patří lysin. Snížení relativního obsahu lysinu může být důsledkem zvýšení lepkových proteinů, což může souviset s nadměrným využíváním dusíkatých hnojiv (Li et al. 2016). V tabulce 1 je uvedeno porovnání obsahu aminokyselin v pšenici seté a špaldě. Pro špaldu je charakteristické vyšší zastoupení některých esenciálních aminokyselin (Prugar et al. 2008).

Tabulka 1 Porovnání aminokyselin u pšenice seté a špaldy (Prugar et al. 2008)

Aminokyseliny	Pšenice setá (g/100 g proteinu)	Pšenice špalda
Leucin	6,0	9,0
Methionin	2,4	4,0
Lysin	3,4	2,8
Fenylalanin	5,0	7,0

Pšeničné proteiny lze rozdělit do čtyř typů na základě rozpustnosti. A to na albuminy (rozpustné ve vodě a zředěném solném roztoku), globuliny (nerozpustné ve vodě, ale rozpustné v solném roztoku), gluteniny (rozpustné ve zředěném kyselém a alkalickém roztoku) a gliadiny (rozpustné v etanolovém roztoku). Albuminy a globuliny jsou strukturní proteiny, které tvoří asi 15–20 % celkového obsahu proteinů v sušině. Jsou využívány hlavně k regulaci metabolických aktivit během vývoje endospermu pšenice, mají ale malý vliv na kvalitu zpracování pšeničné mouky. Gliadiny a gluteniny, tvořící až 85 % všech proteinů, jsou klíčové pro specifické viskoelastické charakteristiky pšeničného těsta. Tyto vlastnosti, které zahrnují elasticitu a tažnost, hrají rozhodující roli při hodnocení finální kvality pšeničných odrůd a mouky z nich. (Guo et al. 2021; Shevkani et al. 2024).

Pšeničné proteiny mohou u některých jedinců vyvolávat vážné zdravotní problémy. Jedná se o autoimunitní onemocnění s názvem celiakie, které bývá nesprávně označováno jako alergie na lepek. Celiakii způsobují prolaminy obilného zrna, tedy gliadiny pšenice, sekalin žita, hordein ječmene a avenin ovsa. Toxicita klesá v uvedeném pořadí (Prugar et al. 2008). Postihuje především děti, ovšem v posledních letech byl zaznamenán nárůst onemocnění u dospělých osob nad 60 let. V tenkém střevě chybí enzym peptidasa, který štěpí nízkomolekulární peptidy, ty se hromadí ve střevním traktu a po dosažení určité koncentrace vyvolávají onemocnění celiakie. Onemocnění je nevyлéčitelné, lze kompenzovat pouze celoživotní bezlepkovou dietou (Gatti et al. 2024).

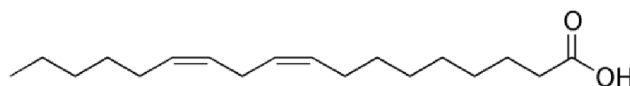
V České republice bylo v roce 2022 podle Národního registru hrazených zdravotních služeb o vykázaných diagnózách diagnostikováno celkem 26 289 případů osob s celiakií. Z toho bylo 8 277 mužů a 18 012 žen. Od roku 2016 do roku 2022 celkové počty onemocnění rostou. Počty případů onemocnění jsou znázorněny v tabulce 2. Prevalence celiakie v populaci činí 1:100 a je diagnostikována přibližně ¼ nemocných osob.

Tabulka 2 Počty případů onemocnění celiakií v ČR (ÚZIS 2023)

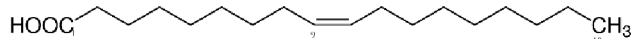
Věk	2016		2022	
	muži	ženy	muži	ženy
0–9	1 595	2 254	1 769	2 538
10–19	1 606	2 614	2 381	3 832
20–29	736	2 165	738	2 049
30–39	897	2 621	867	2 620
40–49	771	2 319	1 076	3 175
50–59	505	1 306	615	1 783
60–69	403	1 001	502	1 163
70–79	204	383	256	686
80–89	67	111	70	155
90+	5	6	3	11
Celkem	6 789	14 780	8 277	18 012
Celkem (muži + ženy)	21 569		26 289	

3.1.1.3 Lipidy

Pšeničné zrno obsahuje mezi 1,5 a 3 % lipidů, které se skládají hlavně z linolové a olejové kyseliny a fosfolipidů. Strukturální vzorce jsou znázorněny na obrázku 3 a 4. Fosfolipidy obsahují kyselinu fosforečnou a dusíkatou složku. Většina lipidů se nachází v oblasti klíčku. I když tvoří malou část celkového složení pšeničného zrna, jejich role je důležitá. Lipidy jsou klíčové pro skladování obilí a mouky. Rozkladem fosfolipidů se uvolňuje kyselina fosforečná a mastné kyseliny, vedoucí ke zvýšení kyselosti. Oxidační změny lipidů mohou způsobit nežádoucí zhoršení sensorických vlastností, jako je žluknutí. Lipidy jsou také důležité pro pekárenskou technologii. Nenasycené mastné kyseliny ovlivňují vzájemné přeměny thiolových a disulfidických skupin proteinů, ovlivňující reologické vlastnosti těsta. Některé lipidy se vážou na molekuly škrobu a proteinů a podílejí se na biochemických procesech během kynutí a pečení těsta. (Yazar et al. 2022; Sun et al. 2023)



Obrázek 3 Strukturální vzorec linolové kyseliny



Obrázek 4 Strukturální vzorec olejové kyseliny

3.1.1.4 Vitaminy

Většina vitaminů je obsažena v klíčku a v aleuronové vrstvě. Při mlynářském zpracování se tyto části obvykle dostávají do otrub a tmavých mouk, což snižuje vitaminový podíl světlých mouk. Úbytek může představovat i více než polovinu původního obsahu zrna. Cereálie pokrývají průměrně na jednoho spotřebitele například potřebu thiaminu z 30 %, riboflavinu z 15 %, niacinu z 25 % atd (Pehlivan et al. 2021; Liu et al. 2024). Průměrné obsahy vitaminů na 100 g sušiny jsou uvedeny v tabulce 3. (Prugar et al. 2008)

Tabulka 3 Průměrné obsahy vitaminů na 100 g sušiny (Prugar et al. 2008)

Vitamin	Obsah (mg/100 g sušiny)
Thiamin	0,45
Riboflavin	0,15
Niacin	5,0
Pantothénová kyselina	1,0
Pyridoxin	0,4
Listová kyselina	0,15
Biotin	0,015
Tokoferoly	3,0

3.1.1.5 Minerální látky

Stejně jako vitaminy, i většina minerálních látek se nachází v klíčku a obalových vrstvách. Obsah popelovin se v mouce pohybuje v rozmezí 1,4 a 3 % a je ukazatelem stupně vymletí, což je proces, při kterém se obalové vrstvy a klíčky oddělují od endospermu zrna. Z celkového množství minerálních látek přechází do konzumních mouk cca 75 % vápníku, 50 % fosforu a 20 % železa. Čím světlejší je daná mouka, tím je tato bilance horší (Caldelas et al. 2023). Průměrné obsahy vitaminů na 100 g sušiny jsou uvedeny v tabulce 4. (Prugar et al. 2008)

Tabulka 4 Průměrné obsahy vitaminů na 100 g sušiny (Prugar et al. 2008)

Minerální látka	Obsah (mg/100 g sušiny)
Fosfor	450
Draslík	380
Síra	160
Hořčík	140
Vápník	60
Sodík	30
Železo	5
Mangan	4,5
Zinek	3
Bór	2,5
Měď	0,7

3.2 Pšenice špalda

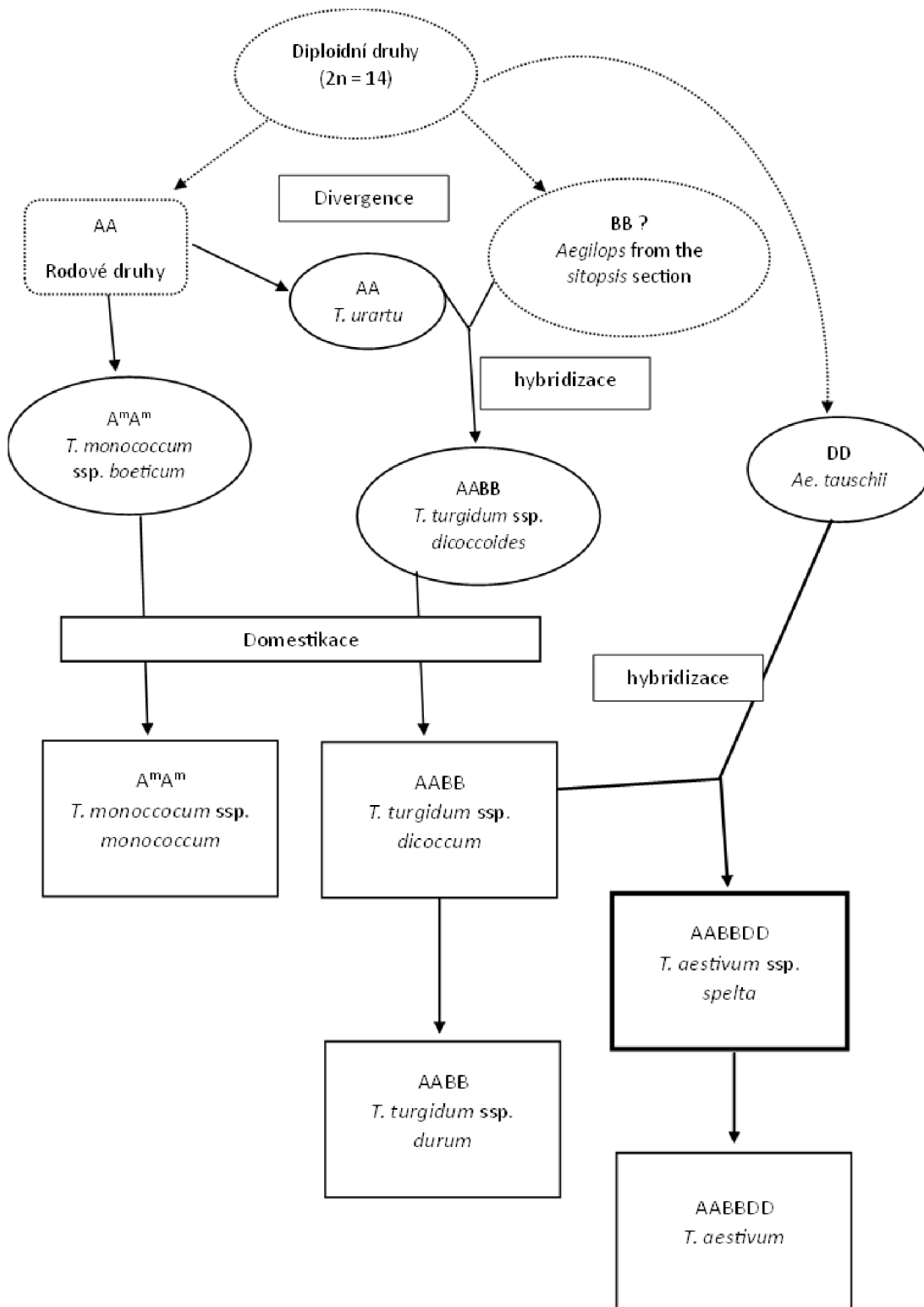
Pšenice špalda (*Triticum aestivum* subsp. *spelta* L.) je v dnešní době čím dál oblíbenější a využívanější surovinou. Stále modernější surovinou pekařských výrobků se stává částečně i kvůli své schopnosti růst v ekologickém zemědělství (Tóth et al. 2022). Špalda je považována za alternativní plodinu, která roste bez zvláštních půdních a klimatických nároků. Mezi její výhody se řadí např. vysoká adaptace na drsné ekologické podmínky a odolnost vůči chorobám, včetně žluté rzi, *Pythium aristoporum* Vanterpool a *Fusarium* spp., a to díky genetickému polymorfismu její populace (Kema 1992; Sugár et al. 2019). Díky svým nutričním vlastnostem, příjemné vůni a chuti (tj. ořechová) jsou špaldová mouka i pekařské výrobky z ní u konzumentů velmi oblíbené (Kandić et al. 2023). Špaldová mouka může být použita na výrobu široké škály výrobků, jako je chléb, nudle, těstoviny, sušenky, pivo nebo jako surovina k obohacení pekařských výrobků (Kulathunga et al. 2020; Cao et al. 2022).

Jedná se o pluchatou hexaploidní pšenici ($2n = 42$), která původně vznikla křížením divokých jednozrnků *T. boeoticum* a *Aegilops speltoides*. Následně vznikla divoká dvouzrnka *T. dicoccoides*. Křížením *T. dicocum* a *Aegilops squarrosa* dala vzniku *Triticum spelta* (Chantret et al. 2005). Křížení špaldy je znázorněno na obrázku 5.

Pšenice špalda byla pěstována již před tisíci lety starověkými civilizacemi a na Blízkém východě. Ve dvacátém století byla téměř ve všech oblastech, kde se pěstovala, nahrazena moderní pšenicí. Pěstování tedy značně pokleslo, ale jak již bylo zmíněno, v posledních letech se opět rozšiřuje (Winterová et al. 2016).

Mezi hlavní složky zrna špaldy (i klasické pšenice seté) se řadí sacharidy, z nich má hlavní zastoupení škrob, dále proteiny a lipidy. Právě obsah proteinů je jedním z nejdůležitějších technologických parametrů obilných zrn. Určuje jejich konečné využití na základě hladiny lepkových zrn (Kandić et al. 2023; Warechowska et al. 2023).

Gluteniny jsou považovány za největší proteinové molekuly v přírodě. Gliadiny zajišťují těstu tažnost nebo viskozitu. Glutenové proteiny propůjčují těstu elasticitu nebo pevnost (Cao et al. 2022). Právě lepkové proteiny jsou nejvíce studovanými proteiny v potravinářských výzkumech (Bonilla et al. 2020).



Obrázek 5 Evoluce špaldy (Chantret et al. 2005)

3.2.1 Skladba zrna pšenice špaldy

Vlastnosti zrna jsou určeny enviromentálními, agronomickými a genetickými faktory. Například minerální hnojení je jedním z agrotechnických faktorů, které určují kvalitu mletí špaldového zrna. Uvedení autoři během sklizňového experimentu prokázali, že hnojení dusíkem, mikroživinami a jejich interakcemi významně ovlivnily kvalitu mletí zrna špaldy (Knapowski et al. 2016; Żuk-Gołaszewska et al. 2018).

3.2.1.1 Obsah proteinů

Celkový obsah proteinů v znu pšenice špaldy se pohybuje mezi 13 až 19 % sušiny. Existuje řada názorů na aminokyselinové složení proteinů špaldy. Ovšem mezi aminokyselinovým složením špaldy a pšenice seté není významný rozdíl (Biel et al. 2016). Obsah proteinů je jedním z nejdůležitějších technologických parametrů pšeničných zrn, který určuje jejich konečné využití prostřednictvím hladiny lepkových proteinů, jež ovlivňují konečnou kvalitu pekařských výrobků (Belcar et al. 2020).

Lepek, jako klíčový parametr, ovlivňuje pečicí vlastnosti obilovin tím, že má vliv na schopnost absorbovat vodu, na soudržnost, viskozitu a pružnost těsta. Uvádí se, že špaldová mouka se vyznačuje vysokou viskozitou a plasticitou a je méně pružná ve srovnání s těstem z běžné pšeničné mouky (Wieser 2007; Sobczyk et al. 2017).

3.2.1.2 Obsah sacharidů

Škrob, směs dvou polymerů amylozy a amylopektinu, je hlavní zásobní složkou ve škrobovém endospermu obilných zrn. Zvýšení obsahu škrobu je z velké části zodpovědné za zvýšení velikosti zrna dosažené šlechtěním za účelem produkce vysoce výnosných odrůd pšenice. Kromě toho je důležitým determinantem dynamických vlastností těsta, zejména při zahřívání (Shewry et al. 2013).

Obsah hrubé vlákniny v znu se pohybuje v rozmezí mezi 10,5 až 14,9 % sušiny. Hlavními složkami vlákniny jsou složky buněčných stěn, polysacharidy hemicelulóza, celulóza, β -glukan a lignin. Pro nutriční kvalitu je velmi důležitý rozdíl mezi rozpustnou a nerozpustnou vlákninou, protože každá složka vlákniny má individuální vliv na fyziologické procesy (Biel et al. 2016). Rozpustná vláknina má význam pro trávicí soustavu tím, že reguluje trávení lipidů. Má schopnost absorbovat vodu, bobtnat a fermentovat v trávicím traktu, což jí umožňuje sloužit jako zdroj energie. Naopak nerozpustná vláknina neslouží jako zdroj energie. Místo toho zvyšuje objem stolice ve střevech a urychluje její průchod trávicím traktem. Nerozpustná vláknina tak může podporovat laxaci (Shen et al. 2024).

3.2.1.3 Obsah lipidů

Pšenice špalda je unikátní pro svůj obsah lipidů, zejména nenasycených mastných kyselin, které mají pozitivní vliv na kardiovaskulární systém. Snižuje riziko civilizačních onemocnění, jako je ischemická choroba srdeční nebo ateroskleróza (Biel et al. 2016). Hlavní nenasycenou mastnou kyselinou ve špaldě je linolová kyselina (Suchowilska et al. 2009). Bylo prokázáno, že špalda obsahuje dvakrát více lipidů než pšenice setá (Grela 1996).

3.2.1.4 Obsah vitaminů a minerálních látek

Špalda obsahuje více vitaminů B1, B2, B3, A, E a D. Špalda obsahuje vyšší množství některých minerálních látek, jako je například draslík, hořčík nebo fosfor (Grela 1996).

3.2.2 Porovnání pšenice seté a pšenice špaldy

Složením špaldy a jejím porovnáváním s jinými druhy obilovin se zabývá celá řada výzkumů. Jejich zjištění jsou někdy protichůdná, zřejmě kvůli použití několika genotypů (Takač et al. 2022).

Pšenice špalda se stala vyhledávanou zejména díky nutričním vlastnostem, jako je vysoký obsah proteinů a vysoký obsah lipidů. Porovnání obsahů proteinů a lipidů (%) je znázorněno v tabulce 5. Oproti klasické pšenici seté se vyznačuje také vysokou odolností škrobu, fotochemikáliemi, dále se liší i obsahem antioxidantů (např. luteinu). Špalda je doporučována při léčbě onemocnění s vysokou hladinou cholesterolu v krvi, také při léčbě ulcerózní kolitidy a vysokého krevního tlaku. Je vhodná i při prevenci proti revmatoidnímu onemocnění (Righetti et al. 2016).

Tabulka 5 Porovnání obsahů proteinů a lipidů (%) v pšenici špaldě a seté (Gebruers et al. 2008)

	Pšenice špalda	Pšenice setá
Proteiny (%)	15,6	14,9
Lipidy (%)	2,5	2,1

Špalda se neliší pouze v obsahu proteinů, ale má i odlišné složení zásobních proteinů. Poměr gliadinů ke gluteninům (Gli/Glu) byl zjištěn u špaldy mezi 2,8 a 4,0, zatímco u pšenice seté je tato hodnota udávána mezi 1,5 a 3,1. To odkazuje na vyšší tažnost těsta a menší objem chleba u pšenice špaldy (Tóth et al. 2022).

Pšenice špalda se vyznačuje lehce vyšším obsahem rozpustné vlákniny, která v kontaktu s vodou bobtná, čímž se zpomaluje její prostupnost trávicím traktem. V tenkém střevě omezuje vstřebávání některých živin. Dále se zpomaluje vstřebávání glukosy, tím se snižuje rychlost nárstu glykemie v krvi (Hidalgo & Brandolini 2014).

Epidemiologické studie spojují konzumaci celozrnných obilovin a výrobků z nich se zdravotními přínosy proti rozvoji a progresi civilizačních onemocnění, jako je ischemická choroba srdeční a diabetes mellitus 2. typu (de Almeida et al. 2020). Tyto účinky jsou připisovány kombinovanému působení vlákniny a bioaktivních látek, jako jsou například fenolické sloučeniny (Fardet 2010).

Piergiorgianni et al. (2009) zjistili, že mezi hlavní minerální složky pšenice se řadí draslík, hořčík, vápník a fosfor, hodnoty jsou uvedeny v tabulce 6. Hladiny vápníku, mědi a draslíku se od sebe mezi pšenicemi nijak významně nelišily. Ale vzhledem k tomu, že u ostatních testovaných prvků byly hladiny vyšší u pšenice špaldy, lze u tohoto druhu předpokládat efektivnější příjem minerálních látek. Jsou ovšem zapotřebí další studie o skutečné biologické dostupnosti minerálních látek v loupaných pšeničných zrnech.

Tabulka 6 Průměrné obsahy minerálních látek (mg/kg) u pšenice seté a špaldy (Piergiovanni et al. 2009)

	P	K	Mg	Ca	Na	Cu	Zn	Fe
	(mg/kg)							
Pšenice špalda	4 060	4 740	1 090	425	43,9	5,2	49,8	69,5
Pšenice setá	3 550	4 530	950	437	38,2	4,1	32,8	60,6

Nicméně různé publikované práce zabývající se složením zrna a genetickými variacemi pro minerální látky mají některé výsledky a závěry nesouhlasné. Některé vědecké práce jsou kritizovány za nespolehlivá statistická srovnání s jinými druhy obilovin, jako je pšenice setá. (Gomez-Becerra et al. 2010). Další vědecké práce udávají, že špalda je bohatým zdrojem jak zinku, tak i železa a vápníku (Rude et al. 2009; Gomez-Becerra et al. 2010).

3.2.3 Nutriční a technologické vlastnosti pšenice špaldy

Jedná se o pluchatou obilovinu. Proto před dalším zpracováním prochází špalda nákladným procesem loupání (Winterová et al. 2016). Zrna špaldy jsou pokryta silnou vrstvou plev, které poskytují ochranu před vnějšími škodlivými vlivy, ale ztěžují sklizeň a zpracování. Dochází tedy k posklizňovému výmlatu (Sinkovič et al. 2023). Špalda má menší výnosy na sklizňovou plochu až o 37 % ve srovnání s pšenicí setou. A nutné loupání činí špaldu dražší než pšenicí setou (Winterová et al. 2016).

Mezi základní technologické vlastnosti patří zejména lepkový profil špaldy, která udává pekařskou kvalitu pšeničné mouky. Jak je již výše zmiňováno, lepkové proteiny se řadí mezi zásobní proteiny a dělí se na gliadiny (Gli) a gluteniny (Glu). Zvláštní význam pro kvalitu pečení má jedna z frakcí gluteninů, a to makropolymer gluteninu (GMP), který je nerozpustný ve vodném roztoku. Jedná se o jeden z největších biopolymerů na bázi proteinů (Don et al. 2003).

Světlá mouka z běžné pšenice vykazovala poměr Gli/Glu mezi 1,7–3,1 (Wieser & Kieffer 2001) a 1,4–2,1 (Thanhaeuser et al. 2014), zatímco mouka ze špaldy měla 2,2–9,0 (Koenig et al. 2015) a pšenice tvrdá obsahovala lepkových proteinů 3,1–5,0 (Wieser 2000; Wieser et al. 2003). Obsah Glu je významným ukazatelem pro konečný objem chleba. Pokud jde o obsah GMP, běžná pšenice setá ho obsahovala 8–18 mg GMP/g mouky, ale nejsou k dispozici zatím žádné studie pro špaldu (Geisslitz et al. 2018).

Ve srovnání s běžnou pšenicí dávají mouky starých odrůd (do kterých se řadí i pšenice špalda) měkčí těsta s nízkou elasticitou a vysokou tažností kvůli špatné kvalitě lepku (Sobczyk et al. 2017). Kvalita pečení se obvykle hodnotí pekařskými testy, které jsou časově i pracovně náročné. Proto se místo nich využívají tzv. kvalitativní parametry, jako je obsah hrubého proteinu, obsah mokrého lepku nebo Zelenyho sedimentační test, jenž se používá k predikci pekařské kvality pšeničných mouk. Špalda obtížně dosahuje požadavku, který je kladen na pšenicí pekárenskou, tj. minimálně 35 ml Zelenyho testu. Číslo poklesu dosahuje hodnot srovnatelných s pšenicí. Některé genotypy však mají číslo poklesu relativně nízké. Špalda se ve srovnání s pšenicí setou také vyznačuje nižší farinografickou vazností,

kratší dobou vývinu a stability těsta a vyšším poklesem konzistence. Těsta jsou tedy slabší k odolnosti vůči mechanickému namáhání. Měrný objem pečiva bývá ve srovnání s pšenicí setou také menší, pečivo je ovšem vláčné, neosychá a při správném skladování vydrží dlouho čerstvé (Geisslitz et al. 2018). Porovnání kvalitativních parametrů u pšenice seté a špaldy v tříletém období je uvedeno v tabulce 7.

Tabulka 7 Porovnání kvalitativních parametrů u pšenice seté a špaldy (Capouchová 2001)

Rok	Pšenice	N-látky (%)	Mokrý lepek (%)	Číslo poklesu (s)	Zeleného test (ml)	Gluten index	Popel (%)
1996	Pšenice setá	13,8	39,7	286	23,8	49	2,2
	Pšenice špalda	11,0	27,1	281	32,0	78	1,7
1997	Pšenice setá	14,1	42,7	247	24,6	50	2,1
	Pšenice špalda	11,2	28,0	251	38,0	80	1,8
1998	Pšenice setá	14,4	42,4	260	21,6	36	2,2
	Pšenice špalda	12,9	30,7	269	36,0	73	1,8

3.2.4 Falšování špaldy

Obiloviny představují klíčovou a nezbytnou součást našeho stravování. Fluktuace cen obilovin jsou ovlivněny různorodostí nabídky a poptávky na trhu. Například rostoucí obliba špaldy způsobila zvýšení její tržní ceny v roce 2020 o 25 % ve srovnání s cenou pšenice, což zvyšuje riziko falšování pomocí levnějších druhů obilovin. Vyšší cena je také zapříčiněna tím, že špalda je většinou pěstována v ekologickém zemědělství a jedná se o pšenici, která je pluchatá a musí tak procházet procesem loupání. Je třeba zdůraznit, že obiloviny patří mezi pět nejčastěji falšovaných potravin na světě. To podtrhuje význam sledování a zajištění kvality v oblasti obchodu s touto klíčovou surovinou (Bönick et al. 2017; Kniese et al. 2021; Tsagkaris et al. 2022).

Dalším významným aspektem je, že pšenice může být spojena s různými zdravotními problémy, včetně alergií a intolerancí na lepek, nebo s autoimunitními onemocněními, jako jsou celiakie, ataxie lepku a dermatitis herpetiformis (Harter 2019). V důsledku toho se zvýšila poptávka po bezlepkových nebo "zdravějších" variantách obilovin, jako jsou špalda, žito, dvouzrnka nebo jednozrnka. I přesto, že tyto druhy také obsahují lepkové proteiny, jsou považovány populací za stravitelnější než pšenice. Z tohoto důvodu je stále stoupající důležitost v identifikaci původu a pravosti jednotlivých druhů obilí. Autenticitu zrna lze ověřit pomocí různých metod, včetně chemické analýzy, která zahrnuje měření obsahu popela, vlhkosti, lipidů a proteinů (Armanino & Festab 1996). Dále poměrem izotopů hmotnostní spektrometrie (IRMS), až po spektroskopické metody otisků prstů, jako je nukleární magnetická rezonance (NMR), blízká infračervená záření (NIR) a Ramanova spektroskopie (RS) (Kniese et al. 2021).

V České republice je sledování autentičnosti potravin a kontrola kvality potravin dohledávána několika orgány a institucemi. Stěžejními aktéry v tomto procesu jsou Státní zemědělská a potravinářská inspekce (SZPI), Český obchodní inspektorát (ČOI)

a Ministerstvo zemědělství ČR. SZPI má za úkol pravidelně provádět inspekce a testy potravin na trhu, sledovat autentičnost potravin a zajistit dodržování potravinářských předpisů. Přestože se ČOI primárně zaměřuje na dodržování spotřebitelských práv, může reagovat na stížnosti spotřebitelů ohledně kvality potravin a iniciovat případné vyšetřování. Ministerstvo zemědělství hraje klíčovou roli při tvorbě předpisů a standardů pro potraviny, včetně těch obsahujících špaldu, a spolupracuje s inspektoráty na sledování a ochranu kvality potravin (SZPI 2024).

3.3 Jakostní ukazatele potravinářské pšenice

Jakost pšenice je definována mírou uspokojení potřeb spotřebitele. Existují různé aspekty kvality/jakosti, včetně senzorké (zahrnující vzhled, křupavost), hygienické (zdravotní nezávadnost) a nutriční (vhodné nutriční složení). Technologická kvalita pšenice je určena chemickým složením zrna, především množstvím proteinů uložených v endospermu. Tyto proteiny mohou vytvořit proteinový komplex (lepek) při mechanickém hnětení těsta s vodou a dalšími látkami. Celková technologická kvalita potravinářské pšenice je komplexní a zahrnuje interakce mezi geneticky podmíněnou vnitřní strukturou zrna, zejména proteinů, a vnějšími agroekologickými faktory. (Příhoda et al. 2003).

Odrůdy pšenice jsou rozřazeny ve státních zkouškách ÚKZUZ dle technologické jakosti do následujících skupin:

- **E** – elitní skupina s nejvyšší jakostí
- **A** – kvalitní skupiny
- **B** – chlebová skupina
- **C** – ostatní (nevhodná pro pekařské využití)

Odrůdy pšenice jsou do těchto čtyř jakostních skupin rozděleny na základě vhodnosti pro pekárenské využití, které vychází z kategorií uvedených v tabulce 8.

Tabulka 8 Kritéria hodnocení pšenice ve skupinách pekařské jakosti ve Státních odrůdových zkouškách ÚKZUZ

Kategorie	E (elitní)	A (kvalitní)	C (chlebová)
Obsah dusíkatých látek (%)	12,6	11,8	11
Zeleného test (ml)	49	35	21
Číslo poklesu (s)	286	226	196
Objemová hmotnost (kg/hl)	79	78	76
Vaznost mouky (%)	55,4	53,2	52,1

3.3.1 Vlhkost zrna

Vlhkost zrna pšenice je klíčovým parametrem, který ovlivňuje pekařskou kvalitu a zpracování zrna. Aby byla zajištěna nízká metabolická aktivita zrna a jeho odolnost vůči extrémním podmínkám prostředí, je maximální povolená vlhkost zrna při sklizni stanovena na 14 %. Během skladování je tento parametr zásadní pro udržení technologických vlastností zrna. Výzkum ukazuje, že správná kombinace způsobů skladování zrna a jeho původní kvality může významně přispět k lepšímu zachování jeho pekařských vlastností. Způsoby skladování,

kteře zahrnujı teplotnı řızenı a zabrınenı přıstupu vzduchu, majı přımıy vliv na udržení optimálnı vlhkosti zrna, což je nezbytné pro zachovánı kvality a pekařského potenciálu během delšího zpracovánı (Petrenko et al., 2017).

3.3.2 Zelenyho test

Zelenyho sedimentační test je laboratornı metoda pouřıvaná k hodnocení kvality pšenıčné mouky vzhledem k jejímu potenciálu pro pečení chleba. Tento test měřı sedimentaci mouky ve vodním roztoku a je považován za indikátor obsahu a kvality lepku v mouce. Vyšší hodnoty sedimentace obvykle korelujı s lepší pekařskou kvalitou mouky, protože naznačujı větší množství a lepší kvalitu lepkových proteinů, které jsou zásadnı pro vytváření síťové struktury těsta (Branlard 2009; Konvalina et al. 2012).

3.3.3 Obsah dusíkatých látek

Obsah dusíkatých látek v zrnı pšenice je zásadnı pro pekařskou kvalitu, neboť přımıo ovlivňuje koncentracı a složení proteinů v zrnı. Podle studie aplikace dusıku, zejména pozdnı hnojení dusıkem, je uznávanou metodou pro zvýšení obsahu proteinů, což má pozitivnı dopad na pekařskou kvalitu mouky. Tento efekt je dán nejen zvýšeným celkovým přısunem dusıku, ale také rozdělenou aplikací dusıku, která především podporuje tvorbu proteinů na úkor škrobu v zrnı a prodluřuje dobu naplnění zrna. Výzkum ukazuje, že tyto pozitivnı účinky mohou být přıčítány zejména efektu množství aplikovaného dusıku, protože účinnost využitı hnojiva se zvyšuje při rozdělené aplikaci v přınivých environmentálních podmínkách, což vede k vyššímu přıjmu dusıku rostlinou (Xue et al. 2016).

3.3.4 Obsah mokrého lepku

Obsah mokrého lepku je klıčovým ukazatelem pro hodnocení pekařské kvality mouky, protože lepek významně přıspívá k vlastnostem těsta, jako je elasticita a schopnost zadržovat plyn. Ve studii Czuchajowska a Paszczynska (1996) je uvedeno, že mokřý lepek, kdřž je přıdán do mouky, zlepřuje pekařské vlastnosti tím, že zvyšuje absorpci vody až o 12 % a prodluřuje dobu míchánı mouky. Výsledky ukazujı, že mokřý lepek vylepřuje objem chleba díky lepší interakci s lepkem běžné mouky. Toto zjištění podporuje pouřıtı mokrého lepku v pekařském pŕımyslu, kde jsou jeho viskoelastické vlastnosti nezbytné pro udržení plynů během kynutı těsta, což je zásadnı pro produkci kvalitního pečiva.

3.3.5 Gluten index

Gluten Index (GI) je parametr, který se pouřıvá k hodnocení kvality lepku ve pšenici a je vyjádřen hodnotami od 0 do 100 (%). Optimálnı hodnoty GI se pohybujı mezi 65 a 80 (%). Vyšší hodnoty nad 80 (%) označujı silnı lepek, zatímco hodnoty pod 65 (%) ukazujı na lepek s mírnou až výraznou proteolytickou aktivitou, která je pod 40 (%) extrémnı. GI je zvláště důležitý pro charakterizaci vlastností lepku, jako je jeho schopnost absorpce vody, viskozita a elasticita, což jsou klıčové vlastnosti pro zpracovánı těsta a pečení kvalitního pečiva (Tamba-Berehoiu et al. 2019).

3.4 Reologie

Poznání reologických charakteristik těsta má v pekařském průmyslu zásadní význam, neboť tyto vlastnosti hrají klíčovou roli při předvídání chování těsta během míchání, válení a pečení pekařských výrobků (Dobraszczyk & Morgenstern, 2003). Tyto charakteristiky ovlivňují kvalitu konečného produktu, včetně textury, objemu, pórovitosti a dalších vlastností. Zároveň mají dopad na efektivitu výrobního procesu. Existuje několik zařízení určených k měření reologických vlastností, jako jsou farinograf, extenziograf, amylograf, mixograf a alveograf. Nicméně vzhledem k vysokým nákladům na tato zařízení si jich většina pekáren nemůže dovolit. Naopak stanovení obsahu hlavních chemických složek pomocí standardních laboratorních metod je rozšířeným postupem a predikce reologických vlastností na základě chemického složení představuje efektivní řešení těchto finančních a technologických výzev (Nikolić et al. 2023).

3.4.1 Rapid Visco Analyzer

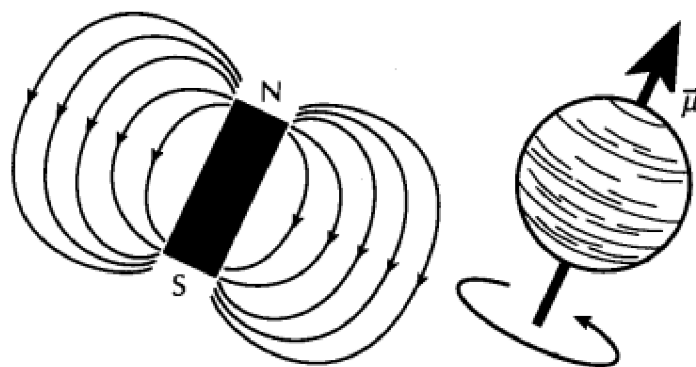
Rapid Visco Analyzer (RVA) je analytický nástroj používaný pro studium reologických vlastností škrobu a škrobových produktů. Tato zařízení jsou běžně využívána v potravinářském průmyslu, výzkumu a kvalitní kontrole potravin a dalších škrobových materiálů. RVA umožňuje monitorovat změny viskoelastických a texturních vlastností těchto materiálů za různých teplot a časů (Yuan et al. 2021; Li et al. 2022).

Další významnou oblastí využití RVA je studium mazovatění škrobu. Tato funkce umožňuje důkladné zkoumání procesu mazovatění, kdy škrob absorbuje vodu a zvyšuje svůj objem a viskozitu. RVA poskytuje také analýzu odolnosti vůči trávení tím, že simuluje trávicí podmínky. Tato schopnost umožňuje detailně studovat, jak škrobové produkty reagují na enzymatický rozklad. Jednou z klíčových funkcí RVA je též zjišťování textury a vlastností výsledného produktu. Poskytované informace o textuře a struktuře škrobových produktů jsou cenné při hodnocení celkové kvality potravin a technologických vlastností škrobu. Díky schopnosti měřit reologické vlastnosti za různých podmínek se Rapid Visco Analyzer stává významným nástrojem pro výzkum, vývoj a kontrolu kvality škrobových produktů, včetně mouky, škrobu a dalších potravinářských surovin (Liu et al. 2019).

3.5 ^1H NMR

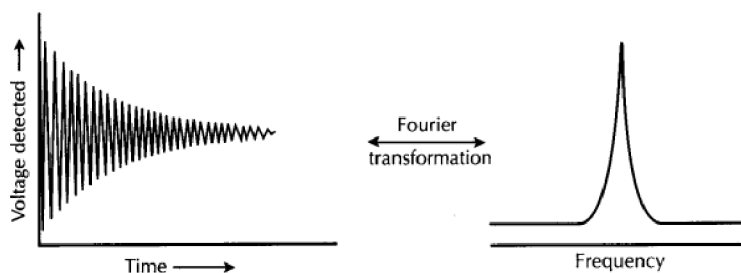
Nukleární magnetická rezonance je spektroskopická metoda, která dosáhla velké oblíbenosti v oblasti chemické analýzy potravinářských výrobků. Je hojně využívána i při detekci padělaných nebo falšovaných potravin, kterými jsou často oleje, med nebo vína. Jedná se o nedestruktivní, selektivní metodu, která je schopná současné detekce velkého množství nízkomolekulárních složek v komplexních směsích. Příprava vzorku pro NMR je jednodušší a časově méně náročná než příprava vzorku pro metody také hojně využívané v potravinářství, jako jsou kapalinová chromatografie nebo kapilární elektroforéza (Košíř & Kidrič 2002; Kupriyanova et al. 2024).

Nukleární magnetická rezonance (NMR) je založena na vlastnosti atomových jader pohlcovat a vysílat záření v rozmezí 10 až 10 000 MHz. Magnetickou rezonanci lze detekovat pouze u nuklidů s lichým počtem protonů a neutronů, jako jsou ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P . Když je vzorek umístěn do silného magnetického pole, atomová jádra v tomto vzorku vykazují magnetický moment μ , který interaguje s vnějším magnetickým polem. (Hemminga 1992). Tento moment je znázorněn na obrázku 6.



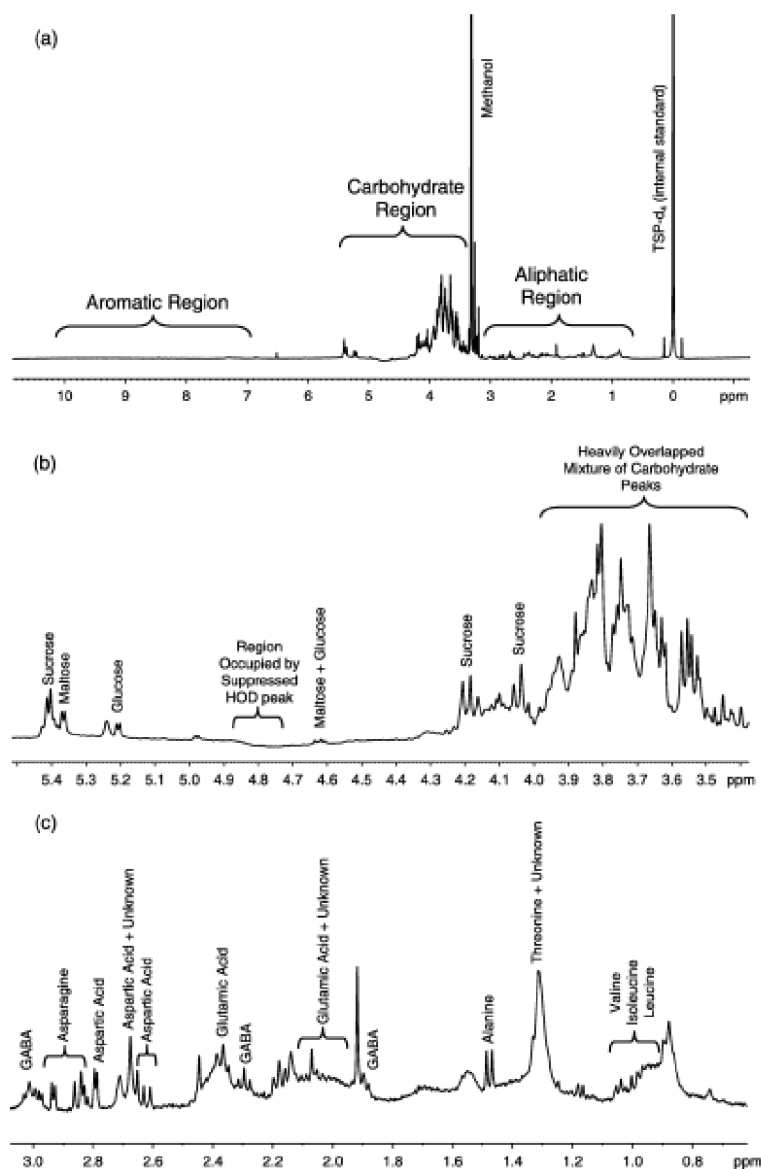
Obrázek 6 Rotující pohyb jádra vytvářející magnetický moment μ (Hemminga 1992)

Při aplikaci radiofrekvenčního pulzu, který odpovídá rezonanční frekvenci atomových jader, některá jádra absorbují energii a přecházejí do excitovaného stavu, tedy do vyšší energetické úrovně. Po skončení pulzu se jádra vracejí do svého původního stavu a uvolňují energii. Tato energie je detekována a využívána k vytváření NMR spektra. Během tohoto procesu se objevuje signál, který se projevuje jako tlumená oscilace, známá jako FID (free induction decay). Tento signál reprezentuje závislost naměřeného elektrického proudu na čase. Fourierovou transformací FID získáme rezonanční frekvence jader ve vzorku a jejich intenzitu, což nám poskytuje spektrum. Převod FID je znázorněn na obrázku 7. Toto spektrum poskytuje informace o chemickém prostředí atomových jader v molekulách, což je klíčové pro identifikaci a kvantifikaci různých chemických skupin (Hemminga 1992; Duckett et al. 2015).



Obrázek 7 Převod free induction decay na spektrum (Hemminga 1992)

Na obrázku 8 je pro příklad znázorněno typické spektrum ^1H NMR polárního extraktu ze vzorku bílé mouky ze studie, kterou vydali Baker et al. 2006. Ve spektru dominují překrývající se sacharidové píky (obrázek „a“), menší píky s protony sacharosy, maltosy a glukosy jsou znázorněny na obrázku „b“. Na obrázku „c“ lze vidět signály z aminokyselin v alifatické části.



Obrázek 8 NMR spektrum vzorku bílé mouky (Baker et al. 2006)

4 Metodika

4.1 Charakteristika vybraných odrůd

Informace o vybraných odrůdách pro hodnocení pekařské jakosti jsou ze Seznamu doporučených odrůd vydané Ústředním kontrolním a zkušebním ústavem zemědělským. Rozdělení odrůd pšenic ozimých pěstovaných ekologickým i konvenčním způsobem dle jakostních skupin je uvedeno v tabulce 9.

Vzorky pro výzkum byly poskytnuty Pokusnou stanicí České zemědělské univerzity v Praze v Uhřetěvsi. Byla hodnocena pšenice setá, která byla pěstována jak konvenčním, tak ekologickým způsobem. Dále byla hodnocena pšenice špalda, pocházející z ekologického způsobu pěstování, a kernza, která byla pěstována v systému s nízkými vstupními náklady (low input system).

Tabulka 9 Rozdělení vzorků pšenice seté do jakostních skupin

Jakostní skupina	Odrůdy
E	Butterfly, Genius, Julie, Pirueta
A	Asory, Bohemia, Fakir, Illusion
B	Campesino, KWS Donovan, Nonstop, Steffi
C	Kalbex, LG Mocca, Mercedes, RGT Sacramento

4.1.1 Asory

Asory je polopozdní až pozdní odrůda kvalitní (A) jakosti. Rostlina má středně až velmi dobře odnožující, středně vysoké a zrno středně velké. Mezi přednosti této pšenice patří odolnost proti napadení padlé pšenice (padlí travním). Pěstitelská rizika představují malá stabilita objemové hmotnosti a čísla poklesu, dále má Asory menší odolnost proti poléhání.

4.1.2 Bohemia

Bohemia je poloraná odrůda kvalitní (A) jakosti. Rostlina má méně odnožující, vysoké až velmi vysoké, zrno velké. Přednostmi jsou vysoký obsah dusíkatých látek a odolnost proti vymrzání. Odrůda je náchylná k napadení sněžnou plísní.

4.1.3 Butterfly

Butterfly je polopozdní až pozdní odrůda elitní (E) jakosti. Rostlina má méně odnožující, vysoké a zrno velké. Mezi přednosti odrůdy se řadí velmi vysoký obsah dusíkatých látek, stabilní číslo poklesu a odolnost proti napadení padlím pšenice (padlím travním). Butterfly má menší odolnost proti napadení hnědou rzivostí pšenice (rzi pšeničnou).

4.1.4 Campesino

Campesino je polopozdní odrůda chlebové (B) jakosti. Rostliny má středně odnožující, středně vysoké a zrno malé. Vyznačuje se stabilním číslem poklesu, odolností proti napadení padlím pšenice, střední odolností až odolností proti napadení hnědou rzivostí pšenice. Odrůda má nízký Zelenyho sedimentační test, nízký obsah dusíkatých látek, nižší objemovou hmotnost. Dále má menší odolnost proti vymrzání.

4.1.5 Fakir

Fakir je polopozdní odrůda kvalitní (A) jakosti. Rostliny má středně odnožující, středně vysoké a zrno středně velké. Mezi přednosti se řadí vysoký obsah dusíkatých látek, odolnost proti vymrzání, odolnost proti napadení žlutou rzivostí pšenice (rzi plevelovou) a padlím pšenice (padlím travním). Odrůda má malou stabilitu čísla poklesu.

4.1.6 Genius

Genius je raná odrůda elitní (E) jakosti. Rostliny má středně odnožující, středně vysoké, zrno má malé až středně velké. Vyznačuje se vysokým obsahem dusíkatých látek a stabilním číslem poklesu. Vyznačuje se střední odolností proti vymrzání, odolností proti napadení padlím pšenice (padlím travním) a žlutou rzivostí pšenice (rzi plevelovou). Odrůda nemá výrazná pěstitelská rizika.

4.1.7 Illusion

Illusion je středně raná odrůda kvalitní (A) jakosti. Rostliny má méně odnožující, středně vysoké, zrno středně velké. Má vysoký obsah dusíkatých látek. Pěstitelským rizikem je nízká úroveň čísla poklesu a menší odolnost proti napadení hnědou rzivostí pšenice (rzi pšeničnou).

4.1.8 Julie

Julie je poloraná odrůda elitní (E) jakosti. Rostliny má méně odnožující, středně vysoké a zrno velké. Vyznačuje se vysokou objemovou hmotností, vysokým obsahem dusíkatých látek a střední odolností až odolností proti vymrzání. Mezi pěstitelská rizika se řadí menší odolnost proti napadení hnědou rzivostí pšenice (rzi pšeničnou). Odrůda Julie má střední až menší odolnost proti poléhání.

4.1.9 Kalbex

Kalbex je poloraná odrůda vhodná pro výrobu sušenek a oplatků (C) s měkkou strukturou endospermu. Rostliny má velmi dobře odnožující, středně vysoké až nízké, zrno středně velké až velké. Odrůda má stabilní číslo poklesu, střední odolnost až odolnost proti napadení padlím pšenice. Pěstitelským rizikem je nižší objemová hmotnost.

4.1.10 KWS Donovan

KWS Donovan je polopozdní až pozdní odrůda chlebové (B) jakosti. Rostliny má velmi dobře odnožující, středně vysoké a zrno středně velké. Odrůda má stabilní číslo poklesu a vysokou objemovou hmotnost. Odrůda se vyznačuje odolností proti napadení žlutou rzivostí pšenice (rzi plevovou). Pěstitelskými riziky jsou menší odolnost proti vymrzání a náchylnost k napadení růžováním klasu pšenice.

4.1.11 LG Mocca

LG Mocca je pozdní odrůda vhodná pro výrobu sušenek a oplatků (C) s měkkou strukturou endospermu. Rostliny má méně odnožující, středně vysoké a zrno středně velké. Mezi přednostmi odrůdy se řadí měkká struktura endospermu a střední odolnost až odolnost proti napadení hnědou rzivostí pšenice (rzi pšeničnou). Pěstitelskými riziky jsou nízká úroveň čísla poklesu, nižší objemová hmotnost a menší odolnost proti napadení žlutou rzivostí pšenice (rzi plevovou).

4.1.12 Mercedes

Mercedes je raná odrůda nevhodná pro pekařské využití (C) s měkkou strukturou endospermu. Rostliny má velmi dobře odnožující, vysoké a zrno velké. Předností je střední odolnost proti napadení růžováním klasu pšenice. Pěstitelskými riziky jsou nízká úroveň čísla poklesu a menší odolnost proti poléhání.

4.1.13 Pirueta

Pirueta je raná odrůda kvalitní (A) jakosti. Rostliny má velmi dobře odnožující, nízké až středně vysoké a zrno středně velké. Vyznačuje se vysokou objemovou hmotností. Odrůda nemá výrazná pěstitelská rizika.

4.1.14 RGT Sacramento

RGT Sacramento je středně raná osinatá odrůda nevhodná pro pekařské využití (C). Rostliny má velmi dobře odnožující, nízké a zrno středně velké. Vyznačuje se stabilním číslem poklesu a odolností proti napadení hnědou rzivostí pšenice (rzi pšeničnou). Pěstitelskými riziky jsou nízký Zelenyho sedimentační test, nižší objemová hmotnost, malá odolnost proti vymrzání a menší odolnost proti napadení padlím pšenice.

4.1.15 Steffi

Steffi je poloraná odrůda chlebové (B) jakosti. Rostliny má středně odnožující, vysoké a zrno středně velké. Odrůda je odolná proti napadení padlím pšenice a žlutou rzivostí pšenice. Mezi pěstitelská rizika je zařazen nízký Zelenyho sedimentační test a nízká úroveň čísla poklesu, dále menší odolnost proti poléhání, menší odolnost proti vymrzání a menší odolnost proti napadení hnědou rzivostí pšenice.

4.1.16 Nonstop

Nonstop je polopozdní odrůda chlebové (B) jakosti. Rostlina má středně odnožující, středně vysoké a zrna velké. Přednostmi jsou odolnost proti napadení padlím pšenice a střední odolnost až odolnost proti napadení žlutou rzivostí pšenice. Odrůda má střední odolnost proti vymrzání. Mezi pěstitelská rizika se řadí nízká úroveň čísla poklesu, nižší objemová hmotnost a náchylnost k napadení růžováním klasu pšenice.

4.1.17 Copper

Červená raná až středně raná odrůda pšenice špaldy s výškou 134 cm, se vyznačuje vysokou odolností proti poléhání, má vysokou odolnost proti žlutým rzím (rez plevová) a plísním. Má dobrý podíl proteinů, velmi dobrý sedimentační index, energický jarní růst a výnosovou stabilitu. Je vyšlechtěna do ekologického zemědělství.

4.1.18 Flauder

Velmi raná, bílá varianta pšenice špaldy. Výška rostliny je 136 cm. Jedná se o první přesívkovou špaldu, která se vyznačuje možností časného jarního setí, je odolná k poléhání, má výborný zdravotní stav klasů, dobrý zdravotní stav listů, dobrou odolnost proti padlí a hnědé rzivosti. Má velmi dobrou odolnost proti fusáriím klasu. Flauder je vhodná pouze pro extenzivní využití. Odrůda má průměrnou pokryvnost půdy, průměrnou objemovou hmotnost, pádové číslo i Zeleného testu a HTS je nízká.

4.1.19 Raisa

Červená raná odrůda špaldy je vhodná pro extenzivní pěstování s výškou rostliny až 134 cm. Jedná se o jednu z nejpěstovanějších odrůd v Bavorsku. Má velmi dobrou odolnost proti padlí a poléhání, listové skvrnitosti a fusáriím klasu. Dále vykazuje velmi dobrou odolnost vůči rzi plevové i pšeničné. Vyniká zdravými listy a klasem, vysokým půdním pokryvem až po dozrávání. Je vhodná pro extenzivní pěstování, má menší zrna a průměrnou objemovou hmotnost, dále velmi vysoký obsah lepku a nízkou HTS. Je vyšlechtěna do ekologického zemědělství.

4.1.20 Rubiota

Rubiota je pozdní odrůda pšenice špaldy, má dobré pekařské vlastnosti. Rostlina má vyšší než 100 cm, červenohnědé barvy. Odrůda je citlivá na napadení padlím pšenice a je vhodná pro nekvalitní půdy. Jedná se o odrůdu českého původu, která je vhodná pro ekologické zemědělství.

4.1.21 Serpentin

Serpentin je středně raná červená odrůda pšenice špaldy vysokého vzrůstu až 140 cm. Je vhodná pro středně dobré až extenzivní stanoviště. Serpentin má velmi energický vývoj s extrémně dobrou pokryvností půdy až do zrání. Není náchylná k poléhání, velmi odolná vůči padlí, dobře odolná vůči rzím, není náchylná k porůstání, dále dobrá odolnost k fusáriím. Vykazuje nadprůměrné výnosy, střední objemovou hmotnost, velmi vysoké pádové číslo, středně vysoký obsah surového lepku, vysoká HTS, vyšlechtěna pro ekologické zemědělství.

4.1.22 Zollernspelz

Zollernspelz je úspěšná odrůda pšenice špaldy vhodná pro ekologické zemědělství. Jedná se o odrůdu s vysokým výnosovým potenciálem a vynikajícími kvalitativními vlastnostmi. Mezi další přednosti této odrůdy patří nízká náchylnost k chorobám a dobrá stabilita čísla poklesu.

4.1.23 Kernza

Zrno Kernzy se sklízí z pšeničné trávy (*Thinopyrum intermedium*). Tato jednoletá pšenice byla pěstována v USA jako krmivo pro hospodářská zvířata. Nyní dochází ke šlechtění tohoto zrna pro lidskou výživu.

Obilnina má hluboce kořenící systém. Výnosový potenciál je vysoký a zbývající části rostliny jsou používány jako krmivo. V dobrých podmínkách může Kernza dosahovat většího počtu zrn, než má pšenice setá. Zrno této odrůdy je vhodné pro celiaky.

4.2 Analytické rozbory

4.2.1 Stanovení vlhkosti

Pomůcky: analytická váha, hliníkové misky, termostatická sušárna, exsikátor

Měření vlhkosti v pšeničných vzorcích bylo provedeno podle normy ČSN EN ISO 712. Na analytické váze bylo do hliníkové misky odváženo 5,00 g homogenizovaného vzorku, který byl v misce rovnoměrně rozprostřen. Miska s odklopeným víkem byla poté umístěna do sušárny předehřáté na 130 °C, kde zůstala po dobu 90 minut. Po uplynutí této doby byla miska uzavřena víkem a umístěna na 30 minut do exsikátoru. Po vychladnutí byly vzorky váženy na analytické váze s přesností na 0,001 g.

Vlhkost byla vypočítána pomocí následujícího vzorce a výsledek byl vyjádřen v procentech na jedno desetinné místo.

$$\frac{(\text{hmotnost před sušením} - \text{hmotnost po sušení}) * 100}{\text{navážka}}$$

4.2.2 Stanovení Zelenyho testu (sedimentačního indexu)

Pomůcky: analytické váhy s přesností vážení $\pm 0,05$ g, laboratorní mlýnek typu FQC se sítem s velikostí otvorů 0,15 mm, přístroj seditester, sedimentační válce se zábrusem a dobře těsnící zátkou, automatická byreta, násypka.

Chemikálie: destilovaná voda, bromfenolová modř (výrobce Honeywell Fluka), Zelenyho roztok (mléčná kyselina, isopropanol, voda; výrobce MACH CHEMIKÁLIE s r.o.)

Stanovení Zelenyho testu bylo provedeno dle normy ČSN EN ISO 5529.

Pracovní postup: Ve dvou opakováních byl proveden sedimentační test pro každý vzorek. Do sedimentačního válce bylo automaticky dávkováno 50 ml bromfenolové modři. Vzorek mouky o hmotnosti 3,2 g byl s přesností $\pm 0,05$ g zvážen na analytické váze. Tento vzorek byl poté přesypán do sedimentačního válce s bromfenolovou modří pomocí násypky a následně byla nasazena zátka. Vzorek byl poté 12krát protřepán.

Protřepaný válec byl umístěn do seditestru a po dobu pěti minut byl kývavě promícháván. Po uplynutí této doby bylo přidáno 25 ml sedimentačního činidla pomocí automatického dávkovače. Promíchávání suspenze pokračovalo dalších pět minut. Po ukončení míchání byl válec ponechán ve svislé poloze po dobu osmi minut pro sedimentaci. Poté byl odečten objem sedimentu s přesností na 1 ml.

Pokud byla vlhkost analytického vzorku v rozmezí 13,5-14,5 %, sedimentační hodnota byla rovna objemu sedimentu v ml. Pokud byl obsah vody ve vzorku odlišný, sedimentační hodnota byla vypočítána podle určitého vzorce. V obou případech byl výsledkem aritmetický průměr hodnot získaných ze dvou měření, zaokrouhlený na celé číslo.

$$\frac{\text{naměřená hodnota} * 86}{\text{sušina}}$$

4.2.3 Stanovení mokrého lepku a gluten indexu

Pomůcky: analytické váhy, vypírací nádobka s jemným sítkem, automatický dávkovač na 5 ml, vypírač lepku Glutomatic, centrifuga

Chemikálie: destilovaná voda, 2% roztok chloridu sodného (výrobce Ing. Petr Švec – PENTA s.r.o.)

Měření mokrého lepku bylo provedeno v souladu s normou ČSN 46 1011-9.

Na analytické váze bylo odváženo 10 g vzorku s přesností na 0,01 g a umístěno do vypírací nádoby s jemným sítkem. Poté bylo pomocí dávkovače přidáno 5 ml roztoku NaCl a nádoba byla vložena do vypírače Glutomatic. Po dokončení první fáze programu byla vyjmuta kulička vypraného lepku a přesunuta do vypírací nádoby s hrubým sítkem, kde byl opětovně spuštěn přístroj Glutomatic. Následně byl centrifugou odstraněn vypírací roztok, který zůstal na povrchu, a poté byl lepek zvážen s přesností na 0,01 g. Toto měření bylo provedeno dvakrát u každého vzorku, kromě kernzy. Ta byla stanovována ručním vypíráním.

Obsah lepku byl vypočítán podle určitého vzorce a výsledek byl uveden na dvě desetinná místa v procentech.

$$\frac{\text{průměrná hodnota hmotnosti} * 10 * 100}{\text{sušina}}$$

Hodnota gluten indexu byla vypočítána podle vzorce a vyjádřena na celé číslo v procentech.

$$\frac{\text{hmotnost lepku ulpělého v sítku} * 100}{\text{celková hmotnost lepku}}$$

4.2.4 Stanovení N-látek

Pomůcky: analytické váhy s přesností na 0,001 g, mineralizační blok, destilační jednotka, mineralizační tuby, Erlenmayerovy baňky, byreta

Chemikálie: katalyzátor (tablety 3,5 g K₂SO₄, 3,5 mg Se) (výrobce Ska-tec), destilovaná voda, hydrogenuhličitan draselný (KHCO₃) (výrobce Ing. Petr Švec – PENTA s.r.o.), metyloranž (výrobce Lach-ner, s.r.o.), kyselina sírová koncentrovaná (H₂SO₄) (výrobce Ing. Petr Švec – PENTA s.r.o.), kyselina sírová 0,2N roztok (výrobce Ing. Petr Švec – PENTA s.r.o.), hydroxid sodný 40% (NaOH) (výrobce Ing. Petr Švec – PENTA s.r.o.), kyselina boritá 1% (H₃BO₃) (výrobce Lach-ner, s.r.o.), Tashiro indikátor

Stanovení dusíkatých látek bylo provedeno v souladu s normou ČSN 1011–18.

Vzorek o hmotnosti 1 g byl s přesností na 0,001 g umístěn do mineralizační tuby. K vzorku byly přidány dvě katalyzátorové tablety a 10 ml koncentrované kyseliny sírové. Obsah tuby byl pečlivě promíchán a bylo přidáno dalších 10 ml koncentrované kyseliny sírové, která sloužila k oplachu vzorku ulpělého na stěnách tuby. Tuba byla poté umístěna do mineralizačního bloku, kde byla udržována konstantní teplota 420 °C po dobu 90 minut. Po přirozeném ochlazení a automatickém přidání 60 ml destilované vody proběhla automatická destilace pomocí vodní páry s přidavkem 70 ml 40% roztoku hydroxidu sodného. Vzniklý amoniak byl zachycen do předlohy obsahující 30 ml 1% roztoku kyseliny borité a Tashiro indikátoru. Množství amoniaku bylo stanoveno titrací 0,2N kyselinou sírovou.

Obsah dusíkatých látek v sušině byl vypočítán podle vzorce, kde přepočítávací faktor pro pšenici je 5,7. Výsledek byl získán jako aritmetický průměr ze dvou měření, vyjádřen na jedno desetinné místo a uveden v procentech.

$$\frac{(0,28 * \text{přepočítávací faktor} * \text{spotřeba H}_2\text{SO}_4 * \text{faktor H}_2\text{SO}_4) * 100}{\text{sušina}}$$

4.2.5 NIR (Blízká infračervená spektroskopie)

Pomůcky: Omega Analyzer G bruns Instruments (Mezos spol s.r.o. Hradec Králové)

Pracovní postup: Vzorek zrna byl nasypán do násypky a analyzován pomocí Omega Analyzeru G ve 3 opakováních.

Stanovení bylo provedeno v souladu s normou ČSN ISO 10878.

Princip: Blízká infračervená spektroskopie (NIR) je analytická technika, která využívá blízkou infračervenou oblast elektromagnetického spektra (od cca 780 nm do 2500 nm). Princip této metody spočívá v měření intenzity absorpce nebo odrazu infračerveného záření látkou. Molekuly ve vzorku interagují s NIR zářením, čímž dochází k vibračním a rotačním pohybům atomů, a to zejména vazeb obsahujících vodík, jako jsou O-H, N-H, a C-H vazby. Absorpční vrcholy a jejich intenzita v NIR spektru poskytují informace o chemické struktuře, koncentraci a fyzikálních vlastnostech látek ve zkoumaném vzorku.

NIR spektroskopie je ceněna pro svou rychlost, neinvazivnost a schopnost poskytovat přesné kvantitativní i kvalitativní informace o analyzovaném materiálu bez potřeby složité přípravy vzorku. Tato metoda je široce využívána v mnoha průmyslových odvětvích včetně

zemědělství, farmaceutiky, potravinářství a environmentální analýzy pro rychlé hodnocení kvality, autentizaci produktů nebo monitorování výrobních procesů.

4.2.6 Rapid visco analyzer – ethanol metod

Pomůcky: analytická váha, kapátko, kádinka, reometr Anton Paar (Graz, Rakousko)

Chemikálie: 98 % etanol (výrobce Ing. Petr Švec – PENTA s.r.o.), destilovaná voda

Pracovní postup: Na analytické váze byly odváženy 3 g vzorku mouky a přidáno 3,5 g etanolu pomocí kapátka. Vzorek byl promíchán, dokud nebyly odstraněny všechny nežádoucí hrudky. Dále bylo přidáno 20 g destilované vody a opět byl vzorek precizně promíchán. Vzorek byl umístěn do reometru a proměřován.

Princip: Rapid Visco Analyzer (RVA) je analytická metoda používaná ke zkoumání viskózních vlastností různých materiálů, včetně potravinářských produktů jako je pšeničná mouka. Tato metoda je využívána pro rychlý, přesný a flexibilní rozbor, který je klíčový pro vývoj produktů a zajištění kvality ve výrobě.

Specificky, metodika "Wheat Flour Ethanol Method" se zaměřuje na hodnocení kvality lepku v pšeničné mouce a kontrolu kvality mouky obecně. Tento profil pomáhá zjistit různé viskózní parametry jako jsou viskozity v různých fázích a teploty, které mohou být indikátory kvality lepku a celkové pekařské kvality mouky.

4.3 ^1H NMR

Pomůcky: analytické váhy, mikrozkušavky 1,5 ml, pipeta na 1000 μl a špičky, vortex, suchá lázeň, centrifuga Ratanta 460 R, 5 mm NMR zkumavka

Chemikálie: $\text{D}_2\text{O}-\text{CD}_3\text{OD}$ (80:20) (oxid deuteria a metanol- d_4 ; výrobce Honeywell Riedel-de Haën),

Pracovní postup: Na analytické váze bylo naváženo 90 mg vzorku s přesností na ± 1 mg do 1,5 ml mikrozkušavky. Do ní byl dále přidán 1 ml $\text{D}_2\text{O}-\text{CD}_3\text{OD}$ (80:20) obsahující 0,05 % w/v TSP (sodná sůl kyseliny 3-(Trimethylsilyl)propionové-2,2,3,3- d_4). Vzorek byl dán do vortexu na 1 minutu. Dále byl vzorek zahříván na 50 $^\circ\text{C}$ po dobu 10 minut v suché lázni. Po zahřátí byl vzorek předán do centrifugy na dobu 5 minut při 24 400 g (odpovídá 15 000 rpm pro odstředivku rotanta 460 R vybavenou rotorem pro mikrozkušavky). Poté bylo z původní mikrozkušavky pomocí pipety odpipetováno 800 μl do nové mikrozkušavky. Supernatant byl zahříván v suché lázni na 90 $^\circ\text{C}$ po dobu 2 minuty. Zahřátý vzorek byl chlazen v lednici 45 minut na 4 $^\circ\text{C}$. Po zchlazení bylo 600 μl vzorku odpipetováno do 5 mm NMR zkumavky.

4.3.1 Měření

NMR spektra byla měřena při 25 °C (298 K) na spektrometru Bruker Avance III vybaveném širokopásmovou sondou SmartProbe™ pro pozorování fluoru s gradienty v ose z USA pracující na frekvenci 500,23 MHz. Zamykání, ladění, topshim a 90° kalibrace pulzů bylo automaticky optimalizováno dle standardních rutin. Každé ¹H NMR spektrum bylo změřeno pomocí pulsního programu Bruker noesy1d s potlačením vodního signálu při 4,84 ppm a bylo získáno 65 tisíc datových bodů se spektrální šířkou 16 ppm, 128 skenů, relaxační prodleva 1 s a akviziční čas 4 s. Všechna spektra byla kalibrována na standard TSP při 0,0 ppm.

4.3.2 Předzpracování spekter, anotace a kvantifikace metabolitů

¹H NMR spektra byla fázována a korigována na základní linii pomocí softwaru Chenomx NMR suite 9,01, profesionální edice (Chenomx Inc., Edmonton, AB, Kanada). Přiřazení signálů bylo provedeno pomocí vestavěné knihovny spekter a publikovaných anotovaných spekter (Baker et al. 2006; Poudel et al. 2021).

4.3.3 Statistická analýza

Pro porovnávání statistického významu metabolitů z různých druhů obilovin a způsobů pěstování byl použit program Statistica 13.0 (TIBCO Software, USA), ENG verze. Byla provedena analýza jednofaktorové Anovy s hladinou pravděpodobnosti P = 95 %. Data byla rozšířena analýzou hlavních komponent (PCA). Tento statistický přístup je užitečný pro identifikaci a kvantifikaci rozdílů mezi skupinami a pro odhalení skrytých trendů v komplexních datech.

5 Výsledky

V této kapitole jsou prezentovány výsledky vlastního výzkumu odrůd pšenice ozimé z různých skupin pekařské kvality a jejich hodnocení v ekologickém a konvenčním způsobu pěstování. Dále jsou zahrnuty výsledky pro pšenici špaldu z ekologického způsobu pěstování a kernzu z low input systému.

5.1 Analytické hodnocení pšenice

Výzkum se zaměřil na srovnání následujících parametrů: vlhkost (%), sušina (%), Zelenyho test (ml), obsah N-látek (%), obsah lepku (%) a gluten indexu (%).

Výsledky pro jednotlivé odrůdy a způsoby pěstování jsou podrobně uvedeny v tabulkách 10 až 17. Tyto tabulky prezentují rozsáhlá data o jednotlivých parametrech a ukazují variabilitu mezi konvenčními a ekologickými metodami pěstování pro každou odrůdu.

Tabulka 10 Analytické hodnocení dvou způsobů pěstování jakostní skupiny A

Odrůda	Způsob pěstování	Vlhkost (%)	Sušina (%)	Zelenyho test (ml)	N-látky (%)	Lepek (%)	GI (%)
Asory	konvenční	9,8	90,2	29	12,4	25,17	86
	ekologický	9,6	90,4	28	10,0	21,96	88
Bohemia	konvenční	9,5	90,5	32	11,3	30,77	30
	ekologický	9,3	90,7	32	11,2	25,91	66
Fakir	konvenční	9,9	90,1	42	12,5	28,02	93
	ekologický	9,5	90,5	28	10,7	21,38	100
Illusion	konvenční	9,4	90,6	29	12,3	31,02	55
	ekologický	9,5	90,5	27	10,7	28,01	66

Tabulka 11 Analytické hodnocení dvou způsobů pěstování jakostní skupiny B

Odrůda	Způsob pěstování	Vlhkost (%)	Sušina (%)	Zelenyho test (ml)	N-látky (%)	Lepek (%)	GI (%)
Campesino	konvenční	9,6	90,4	28	12,1	25,61	73
	ekologický	9,7	90,3	20	11,2	20,32	89
KWS	konvenční	9,6	90,4	28	10,9	27,38	62
Donovan	ekologický	9,7	90,3	13	9,4	20,16	93
Nonstop	konvenční	9,6	90,4	26	11,0	27,54	10
	ekologický	9,5	90,5	20	9,1	24,64	39
Steffi	konvenční	9,7	90,3	22	11,3	24,53	28
	ekologický	9,3	90,7	21	10,3	18,91	79

Tabulka 12 Analytické hodnocení dvou způsobů pěstování jakostní skupiny C

Odrůda	Způsob pěstování	Vlhkost (%)	Sušina (%)	Zeleného test (ml)	N-látky (%)	Lepek (%)	GI (%)
Kalbex	konvenční	10,3	89,7	26	10,9	25,81	78
	ekologický	9,4	90,6	19	9,4	20,58	90
LG Mocca	konvenční	9,6	90,4	19	10,6	27,43	46
	ekologický	8,6	91,4	17	9,3	22,98	60
Mercedes	konvenční	9,9	90,1	18	10,9	22,59	23
	ekologický	10,1	89,9	14	10,0	20,02	39
RGT	konvenční	9,6	90,4	27	10,4	25,33	80
Sacramento	ekologický	9,7	90,3	20	10,7	19,71	100

Tabulka 13 Analytické hodnocení dvou způsobů pěstování jakostní skupiny E

Odrůda	Způsob pěstování	Vlhkost (%)	Sušina (%)	Zeleného test (ml)	N-látky (%)	Lepek (%)	GI (%)
Butterfly	konvenční	10,9	89,1	36	11,8	30,25	57
	ekologický	9,6	90,4	31	10,0	23,51	71
Genius	konvenční	9,5	90,5	34	12,2	30,88	62
	ekologický	9,7	90,3	34	9,3	26,41	76
Julie	konvenční	9,7	90,3	34	12,4	27,24	69
	ekologický	9,5	90,5	33	10,4	23,48	91
Pirueta	konvenční	10,3	89,7	28	10,7	29,65	43
	ekologický	10,2	89,8	24	9,9	24,44	68

Tabulka 14 Analytické hodnocení kernzy pěstované low input systémem

Odrůda	Vlhkost (%)	Sušina (%)	Zeleného test (ml)	N-látky (%)	Lepek (%)
TLI 703	12,3	87,7	19	16,5	33,07
TLI 703	9,8	90,2	20	15,4	30,38
TLI 34715	14,3	85,7	24	18,1	40,96
TLI 703	9,4	90,6	19	15,6	25,39
TLI 701	9,5	90,5	18	15,5	25,41
TLI 703	9,4	90,6	21	16,7	33,22

Tabulka 15 Analytické hodnocení špaldy pěstované ekologickým způsobem

Odrůda	Vlhkost (%)	Sušina (%)	Zeleného test (ml)	N-látky (%)	Lepek (%)	GI (%)
Serpentin	10,7	89,3	9	10,6	25,81	49
Flauder	10,6	89,4	12	10,4	24,22	25
Rubiota	10,9	89,1	18	15,9	44,89	34
Zollernspelz	10,6	89,4	18	11,5	30,31	49
Copper	9,3	90,7	29	14,8	37,65	50
Raisa	10,5	89,5	19	12,1	30,84	42

Tabulka 16 Analytické hodnocení konvenčně pěstovaných vzorků na NIR

Odrůda	Vlhkost (%)	Zeleného test (ml)	N-látky (%)	Lepek (%)	Škrob (%)	W	P	L
Asory	8,7	58	10,6	16,26	71,1	260,8	69,7	89,4
Bohemia	8,2	39	11,8	21,97	69,1	245,2	69,5	97,2
Fakir	8,5	58	11,4	19,53	69,5	281,6	99,3	85,4
Illusion	8,6	63	11,4	18,67	70,9	290,8	104,4	89,3
Campesino	8,5	47	10,3	15,88	71,0	230,6	50,9	93,5
KWS								
Donovan	8,6	50	10,5	16,27	70,5	245,8	68,4	87,8
Nonstop	8,5	55	10,9	16,57	71,0	261,3	88,2	88,5
Steffi	8,8	41	10,2	16,07	70,5	230,0	74,3	84,6
Kalbex	8,9	36	10,1	15,58	71,0	223,1	58,1	93,2
LG Mocca	8,4	30	10,3	17,53	70,0	179,8	53,1	81,3
Mercedes	9,0	38	10,3	15,72	70,2	199,7	77,5	74,1
RGT								
Sacramento	8,3	32	11,3	18,10	69,9	220,0	70,9	107,4
Butterfly	8,7	48	11,5	21,30	69,0	245,7	84,9	82,7
Genius	8,7	64	11,5	18,67	70,0	307,8	89,7	98,7
Julie	8,6	35	10,9	19,53	69,8	193,2	78,9	78,3
Pirueta	9,0	55	11,0	19,13	70,6	241,3	109,1	71,6

Tabulka 17 Analytické hodnocení ekologicky pěstovaných vzorků na NIR

Odrůda	Vlhkost (%)	Zeleného test (ml)	N-látky (%)	Lepek (%)	Škrob (%)	W	P	L
Asory	8,9	54	10,1	15,86	71,7	214,2	70,6	71,4
Bohemia	8,4	35	10,3	17,13	69,9	193,0	66,1	83,8
Fakir	8,6	56	10,1	15,87	70,6	226,7	103,2	65,3
Illusion	8,7	60	10,5	16,23	71,3	259,4	102,5	78,4
Campesino	8,7	40	10,2	15,12	71,8	188,8	48,7	85,2
KWS								
Donovan	8,6	38	10,2	15,57	71,7	175,0	51,9	76,8
Nonstop	8,4	48	10,0	16,93	71,6	224,2	77,0	83,1
Steffi	8,2	33	10,1	15,39	72,2	180,8	64,1	78,2
Kalbex	8,4	23	10,1	16,16	70,5	140,0	60,2	87,8
LG Mocca	8,4	26	10,1	17,27	70,5	137,8	49,7	70,2
Mercedes	8,9	35	14,0	15,41	71,3	155,5	70,7	65,8
RGT								
Sacramento	8,1	23	10,2	20,07	71,0	176,1	60,2	107,3
Butterfly	8,7	44	10,1	16,40	70,2	187,4	86,4	63,4
Genius	8,7	60	10,5	16,17	70,6	277,4	90,2	86,9
Julie	8,1	30	10,1	16,14	70,8	150,0	70,4	73,1
Pirueta	8,7	46	10,4	16,73	71,7	186,2	89,7	66,3

5.1.1 Statistická analýza

Na základě dat lze říci, že výsledky statistické analýzy odhalily zajímavé rozdíly mezi odrůdami pšenice pěstovanými v ekologickém a konvenčním způsobu. Ekologicky pěstované odrůdy vykázaly nižší koncentrace dusíkatých látek (N-látky) a lepku v sušině. To by mohlo být spojeno s rozdílnou dostupností živin v půdě, neboť ekologické zemědělství často využívá méně intenzivní hnojení, a to může ovlivnit množství dostupného dusíku pro růst rostlin. Dusík je zásadním prvkem pro syntézu proteinů, což by vysvětlovalo nižší obsah lepku, který je proteiny bohatým složením zrna.

Vyšší hodnoty v Zeleného testu u ekologicky pěstovaných odrůd mohou naznačovat větší pevnost a lepší zpracovatelnost těsta, které jsou důležité pro pekařskou kvalitu. To může být dáno přirozenějším poměrem složení proteinů a jejich interakcí, které jsou ovlivněny méně intenzivním příjmem živin.

Vyšší gluten index (GI) u ekologicky pěstovaných vzorků může odrážet vyšší kvalitu lepku, který je významným faktorem pro pekařské vlastnosti pšeničné mouky. Lepší kvalita lepku může vést k větší elasticitě těsta a může zlepšovat jeho plyn zadržující schopnost, která je žádoucí pro produkci objemného a vzdušného pečiva. Tyto výsledky by mohly být přičítány organickým pěstebními metodám, které často vedou k pomalejšímu růstu a mohou umožnit lepší vývoj proteinové struktury v zrně.

Zdá se tedy, že ekologický způsob pěstování může pozitivně ovlivňovat pekařskou kvalitu pšenice tím, že zvyšuje kvalitu lepku, což může být preferováno v některých aspektech pekařské výroby. Tato zjištění jsou důležitá pro pekařský průmysl, kde výběr vhodných odrůd pšenice je klíčový pro dosažení specifických vlastností finálního produktu.

Tato zjištění ukazují, jak způsob pěstování může ovlivnit nejen kvalitu a výživovou hodnotu pšenice, ale také její zpracovatelnost a potenciální zdravotní přínosy. V kontextu stále se rozvíjejícího trhu s ekologickými potravinami a rostoucím zájmem o zdravé stravovací návyky, mohou být tyto rozdíly důležité pro spotřebitele i výrobce pekařských výrobků. Je důležité si uvědomit, že každý způsob pěstování přináší unikátní soubor vlastností, které je třeba pečlivě zvážit při hodnocení celkové kvality pšeničných odrůd.

V rámci hodnocení bylo dále zjištěno, že ekologicky pěstované odrůdy pšenice, napříč všemi jakostními skupinami (A, B, C, E), mají tendenci vykazovat nižší obsah N-látek a lepku ve srovnání s konvenčním způsobem pěstování. Tyto rozdíly mohou být důsledkem přirozenějších zemědělských praktik v ekologickém zemědělství, které obvykle omezuje používání syntetických hnojiv a pesticidů, což může mít přímý vliv na metabolické procesy rostliny a akumulaci nutričních látek v zrně.

Rozdíly ve výsledcích Zeleného testu, který odráží kvalitu lepku a pevnost těsta, a v gluten indexu (GI), který hodnotí kvalitu lepku, jsou mezi jakostními skupinami rozdílné a poskytují zajímavý vhled do vlivu ekologického pěstování na kvalitativní vlastnosti pšenice.

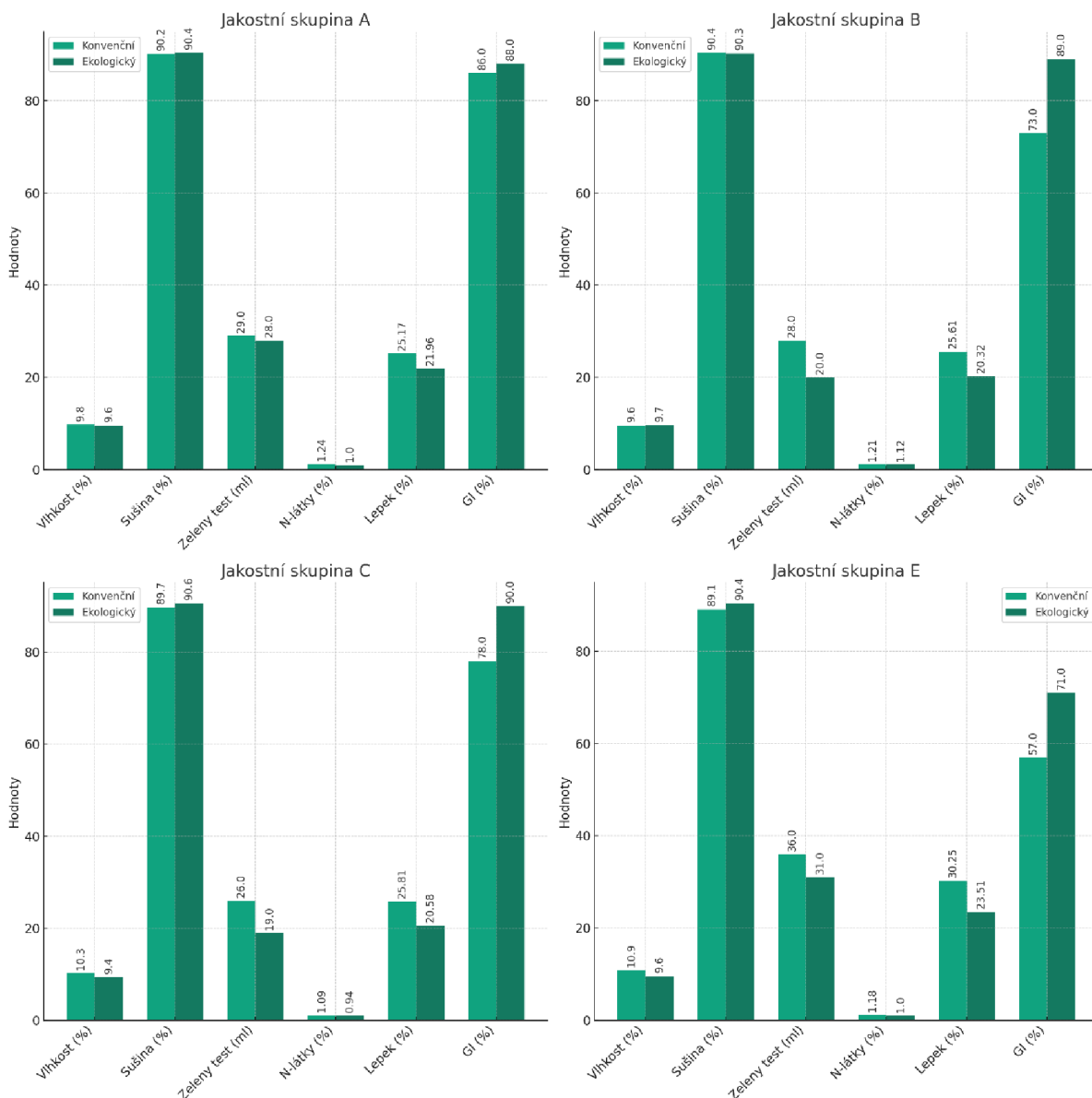
V jakostní skupině A byly ekologicky pěstované odrůdy, které prokázaly vyšší hodnoty Zeleného testu a GI, což může naznačovat lepší pekařské vlastnosti pšenice z této skupiny.

V jakostní skupině B, i přes menší rozdíly v obsahu N-látek a lepku mezi ekologickým a konvenčním způsobem pěstování, ekologické odrůdy udržovaly konkurenceschopnou kvalitu lepku podle GI.

Jakostní skupina C pozorovala výraznější rozdíly ve vlhkosti a sušině mezi ekologickým a konvenčním způsobem pěstování, které mohou ovlivnit pekařské vlastnosti a skladovatelnost zrna, přičemž ekologicky pěstované odrůdy měly tendenci k vyšším hodnotám v Zeleného testu.

V jakostní skupině E byl zaznamenán větší rozptyl v obsahu lepku, a to naznačuje, že ekologický způsob pěstování může mít silnější vliv na proteiny bohaté složky, zejména lepek, které jsou klíčové pro výrobu pečiva s vhodnými nutričními nebo texturními vlastnostmi.

Rozdíly mezi jakostními skupinami v analytických výsledcích zahrnující parametry jako jsou vlhkost, sušina, N-látky, lepek a GI jsou znázorněny na obrázku 9.



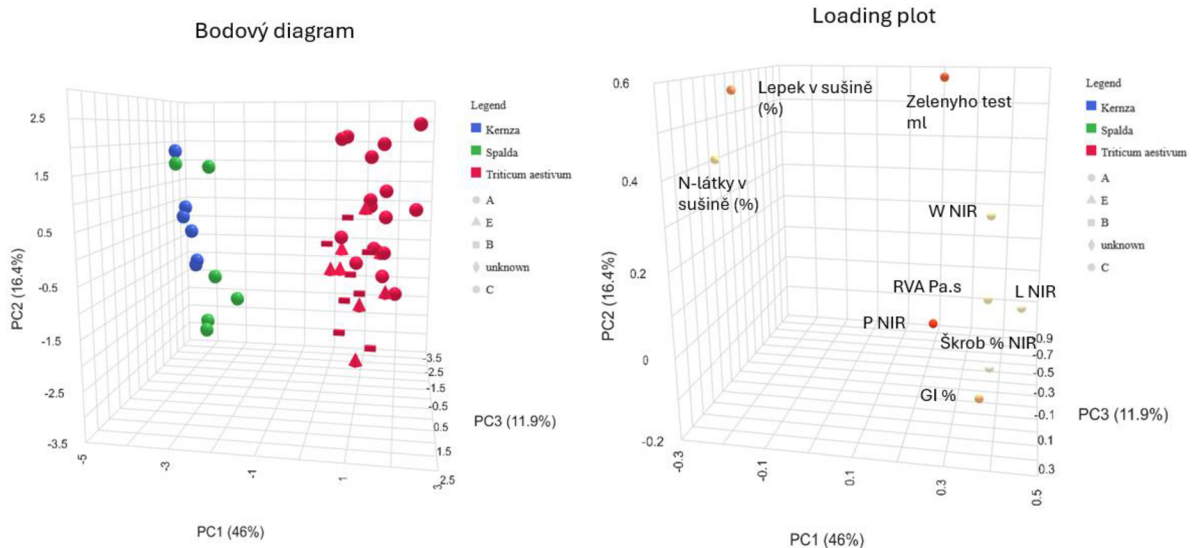
Obrázek 9 Rozdíly mezi jakostními skupinami v analytických výsledcích

Na obrázku 10 jsou prezentovány výsledky analýzy hlavních komponent (PCA) pro tři druhy obilovin: *Triticum aestivum* (pšenice setá), špalda a kernza. Analýza byla zaměřena na zkoumání kvalitativních parametrů těchto obilovin.

Bodový diagram ilustruje rozložení vzorků obilovin v trojrozměrném prostoru PCA, kde osy PC1, PC2 a PC3 představují tři hlavní komponenty, které zachycují největší variabilitu v datech. Každý vzorek je na grafu barevně rozlišen podle druhu obiloviny a je označen podle příslušné jakostní skupiny (A, B, C, E), což umožňuje vizuální srovnání mezi jednotlivými druhy obilovin a jejich jakostními skupinami. Rozložení bodů na grafu naznačuje významné rozdíly v kvalitativních parametrech mezi obilovinami, což může být klíčové pro šlechtění a výběr obilovin pro specifické využití.

Loading plot pak poskytuje důležité informace o příspěvku jednotlivých proměnných, jako jsou lepek v sušině, Zeleného test a obsah N-látek, k rozlišení vzorků, jak je zachyceno v bodovém diagramu.

Z těchto grafů vyplývá, že PCA je formulace pro rozlišování mezi druhy obilovin na základě kvalitativních parametrů. Tato technika může být efektivně využita k identifikaci klíčových faktorů ovlivňujících pekařskou kvalitu.

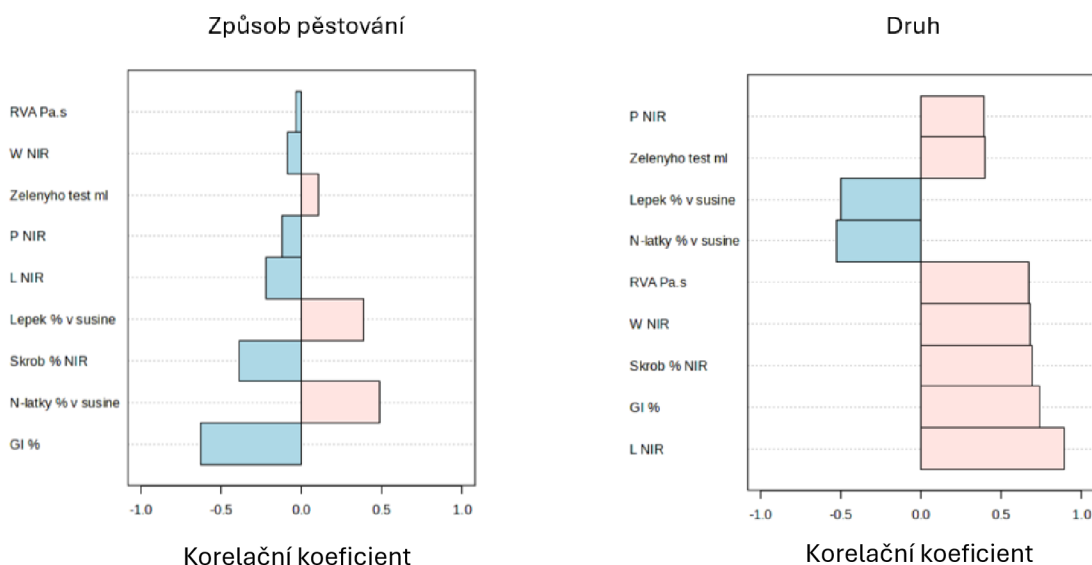


Obrázek 10 Bodový diagram a Loading plot (PCA analýza)

V prezentovaných grafech na obrázku 11 jsou zobrazeny výsledky korelační analýzy, které ilustrují vztahy mezi kvalitativními parametry a dvěma hlavními kategoriemi: způsobem pěstování a druhem pšenice. Na grafu týkajícím se způsobu pěstování lze vidět, že parametry jako Zeleného test (ml), lepek v sušině (%) a N-látky (%) vykazují pozitivní korelaci se způsobem pěstování. To naznačuje, že při přechodu z konvenčního na ekologické pěstování by hodnoty těchto parametrů mohly stoupat. Naopak škrob (%) a Gi (%) jsou negativně korelovány, což ukazuje, že ekologické metody pěstování mohou vést k nižším hodnotám těchto jakostních parametrů.

Na druhém grafu, který se zabývá druhem pšenice, jsou jakostní parametry jako P, Zeleného test (ml), l, GI (%) a škrob (%) spojeny s různými úrovněmi pozitivní korelace, a to naznačuje, že tyto parametry jsou charakteristické pro specifické druhy pšenice. Negativní korelace byla zjištěna u lepku a N-látek v sušině (%).

Tyto grafy poskytují důležité informace o tom, jak různé faktory ovlivňují kvalitativní charakteristiky pšenice. Korelační koeficienty a jejich směry (pozitivní nebo negativní) mohou pomoci v identifikaci klíčových proměnných pro šlechtění nových odrůd a vylepšení pěstebních technik s ohledem na specifické vlastnosti a kvalitu pšenice.



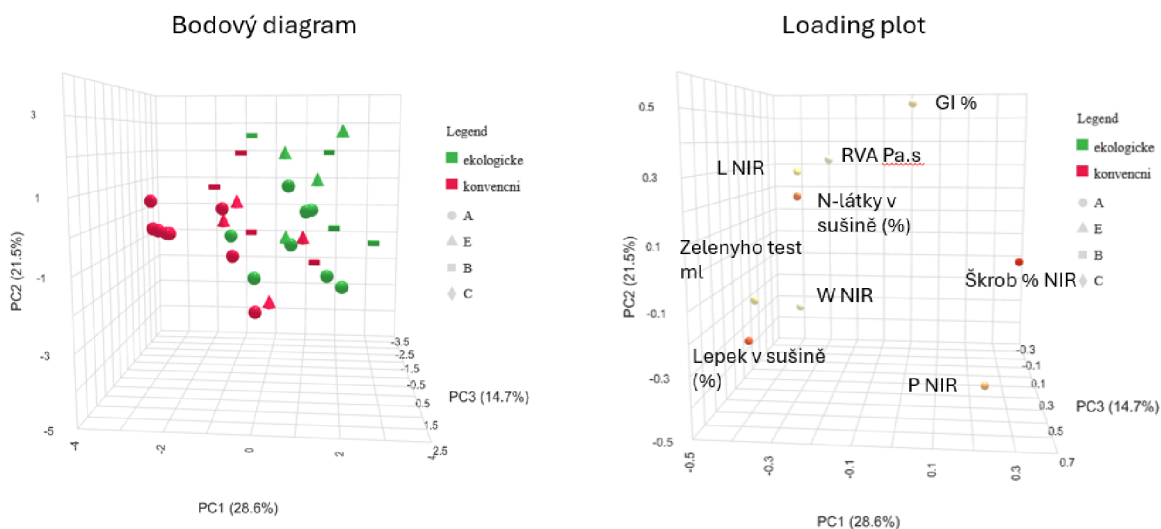
Obrázek 11 Korelační analýza zohledňující způsob pěstování a druh

Analýza hlavních komponent (PCA) pro pšenici *Triticum aestivum* na obázku 12 odhalila rozdíly v chemickém složení mezi ekologicky a konvenčně pěstovanými odrůdami a ukázala, jak jsou tyto rozdíly spojeny s jednotlivými jakostními skupinami (A, B, C, E).

Bodový diagram z analýzy PCA ilustruje rozptýlení vzorků pšenice podle prvních tří hlavních komponent (PC1, PC2 a PC3), které reprezentují největší část variance v datech. PC1, zodpovědná za 28.6% variability, a PC2 s 25.9% variability, odhalily značnou rozmanitost mezi jednotlivými odrůdami. Vzorky ekologicky pěstovaných a konvenčních odrůd lze jasně rozlišit v multidimenzionálním prostoru, což naznačuje odlišné chemické profily ovlivněné rozdílnými pěstebními praktikami. Zároveň jsou zřetelné rozdíly mezi jakostními skupinami, ale překrývání určitých vzorků ukazuje, že faktory ovlivňující jakostní skupiny jsou komplexnější a přesahují jednoduché rozdělení na ekologicky a konvenčně pěstované odrůdy.

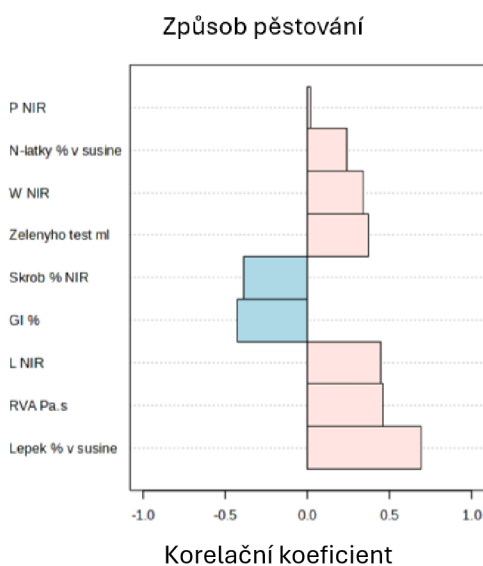
Loading plot následně ukazuje, jak jednotlivé analyzované parametry přispívají k variabilitě neboli ukazují míru vlivu. Například N-látky v sušině (%) a lepek v sušině (%) mají silnou pozitivní korelaci s PC1, zatímco RVA (Pa.s) a GI (%) jsou významné pro PC2. Vliv Zelenyho testu (ml) a W na obě hlavní komponenty ukazuje, že tyto parametry jsou klíčové pro odlišení mezi vzorky a mohou odrážet vlastnosti jako kvalita lepku nebo schopnost zadržování vody.

Tyto výsledky poskytují užitečný vhled do toho, jak pěstební postupy a genetické faktory ovlivňují kvalitu a vlastnosti pšenice *Triticum aestivum*.



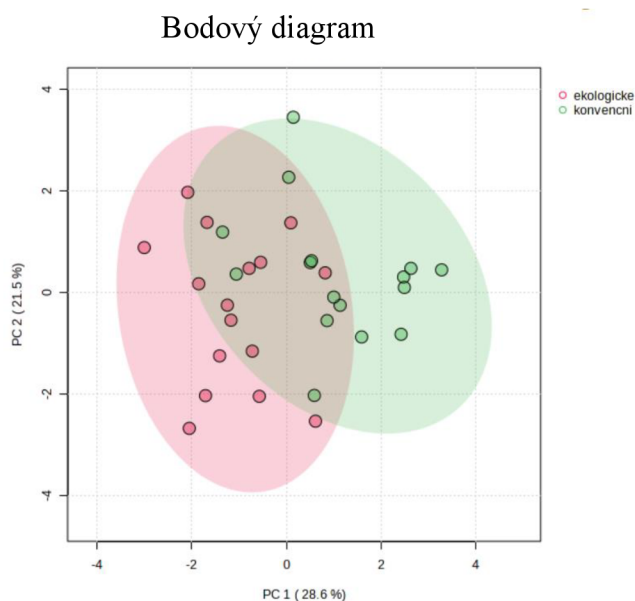
Obrázek 12 PCA hlavních komponent pro *Triticum aestivum*

Korelační analýza na obrázku 13 ukazuje vztah mezi kvalitativními parametry pšenice seté (*Triticum aestivum*) a způsobem jejího pěstování. Z grafu je patrné, že RVA (Pa.s) (viskozita) a lepek (%) v sušině mají výraznou pozitivní korelaci se způsobem pěstování, což naznačuje, že ekologicky pěstovaná pšenice má tendenci vykazovat vyšší viskozitu a vyšší procento lepku ve srovnání s konvenčními metodami. GI (%) a škrob (%) jsou negativně korelovány, a to naznačuje, že mezi způsoby pěstování nejsou v těchto parametrech výrazné rozdíly. Tento graf poskytuje přehled o tom, jak ekologické a konvenční zemědělské praktiky mohou ovlivnit specifické vlastnosti pšenice.



Obrázek 13 Korelační analýzy způsobů pěstování *Triticum aestivum*

Bodový diagram na obrázku 14 pro pšenici setou zobrazuje rozložení odrůd podle prvních dvou hlavních komponent z PCA. První hlavní komponenta (PC1) reprezentovaná na ose x vysvětluje 28.6 % celkové variability, zatímco druhá hlavní komponenta (PC2) na ose y vysvětluje 21.5 % variability. Z grafu je patrné, že mezi ekologicky a konvenčně pěstovanými odrůdami existuje určitý překryv, signalizující možné podobnosti. Nicméně jsou rovněž zřetelné rozdíly v jejich rozložení, což naznačuje, že různé způsoby pěstování mají vliv na chemické složení pšenice.

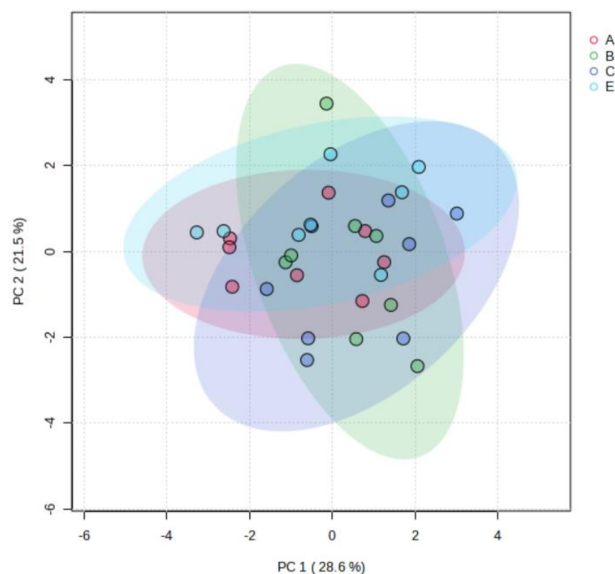


Obrázek 14 Bodový diagram způsobů pěstování *Triticum aestivum*

V bodovém diagramu na obrázku 15 jsou ilustrovány rozdíly ve složení čtyř jakostních skupin *Triticum aestivum* (A, B, C, E) pomocí analýzy hlavních komponent (PCA).

Tato pozorování ve variabilitě a rozložení mohou odrážet vliv genetických faktorů, environmentálních podmínek, nebo metod zpracování, které společně formují kvalitativní charakteristiky zrna v rámci jednotlivých jakostních skupin. Výsledky této analýzy jsou zásadní pro identifikaci skupin, které by mohly být nejvhodnější pro specifické využití, jako je například výroba pečiva, které klade specifické požadavky na kvalitu zrna.

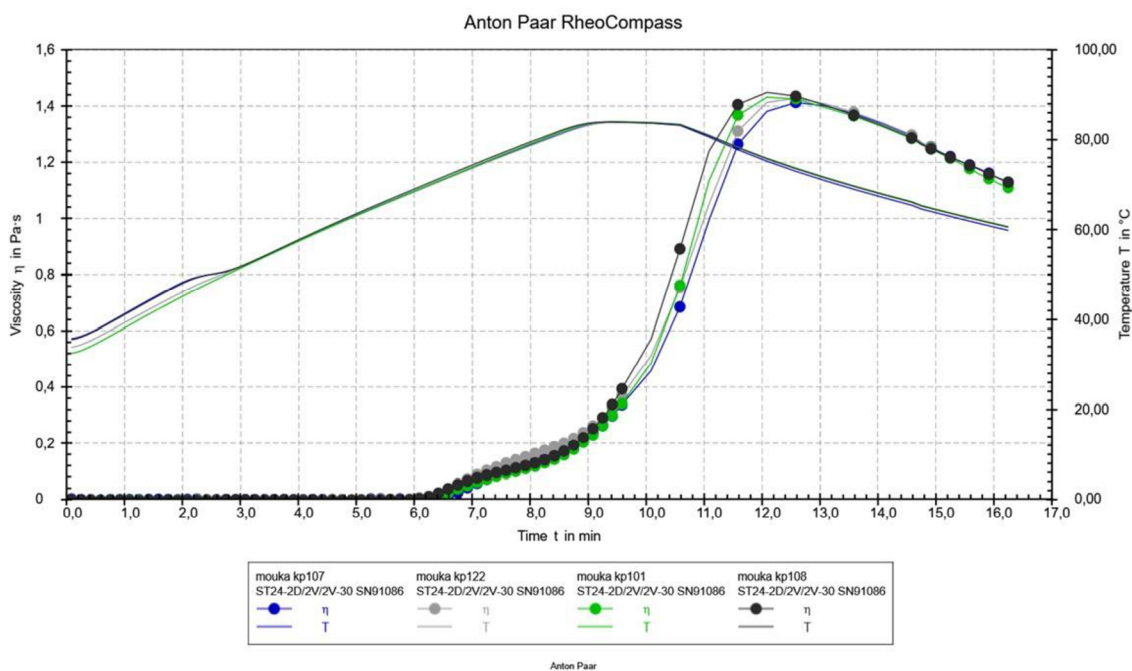
Bodový diagram



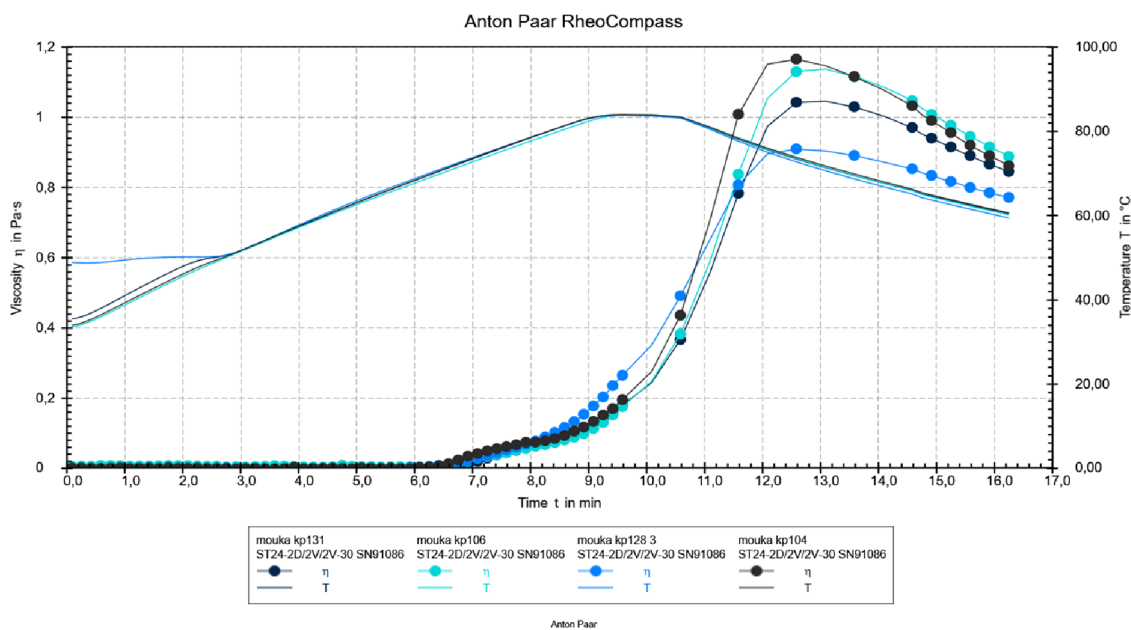
Obrázek 15 Bodový diagram jakostních skupiny vzorků *Triticum aestivum*

5.2 Reologické vlastnosti

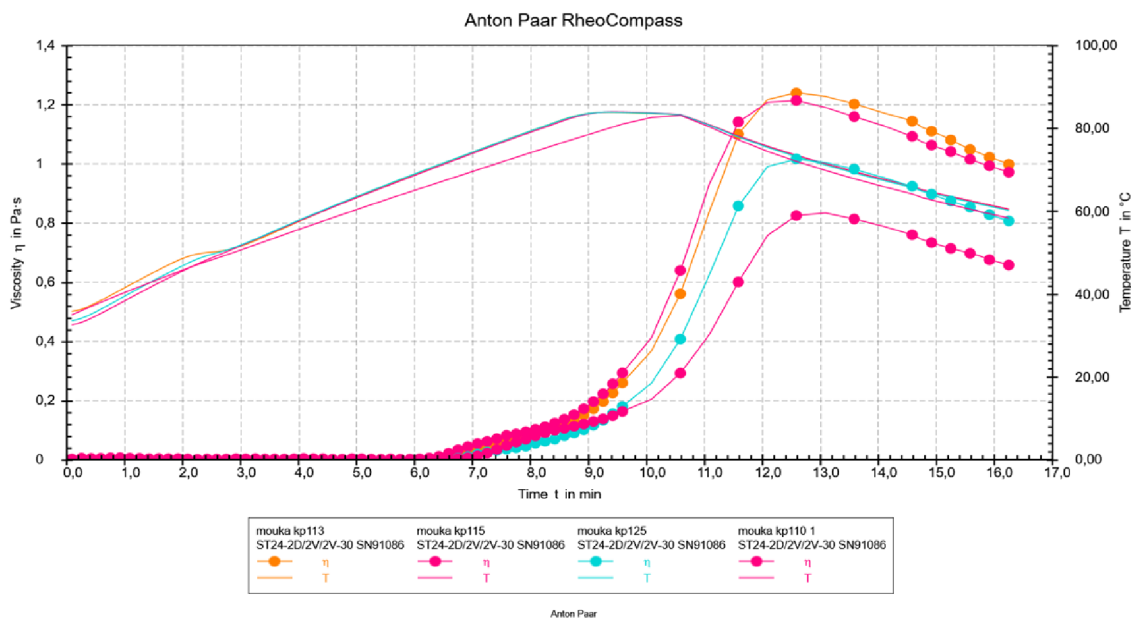
Reologické charakteristiky pšenice jsou prezentovány pomocí Rapid Visco Analyzer (RVA) profilů. Obrázky 16 až 23 ukazují porovnání těchto vlastností u vzorků z různých jakostních skupin a způsobů pěstování. Z grafů je patrné, že způsob pěstování má zřetelný vliv na viskozitu těsta.



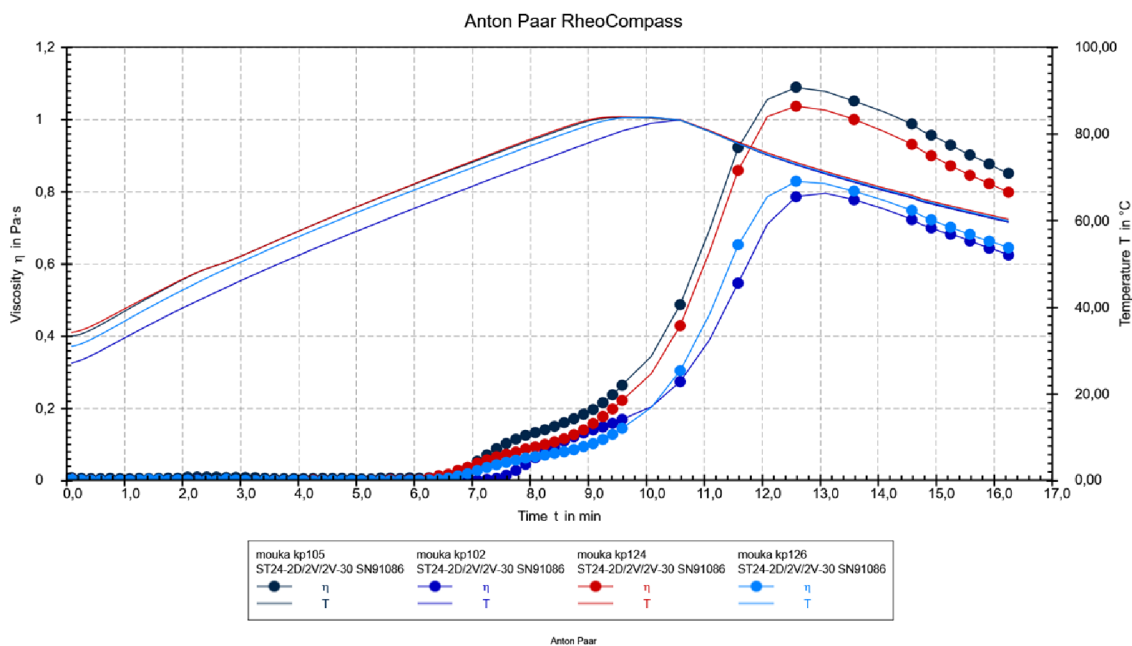
Obrázek 16 Výsledky RVA konvenčně pěstovaných vzorků jakostní skupiny A, kp 107 (Asory), kp 122 (Bohemia), kp 101 (Fakir), kp 108 (Illusion)



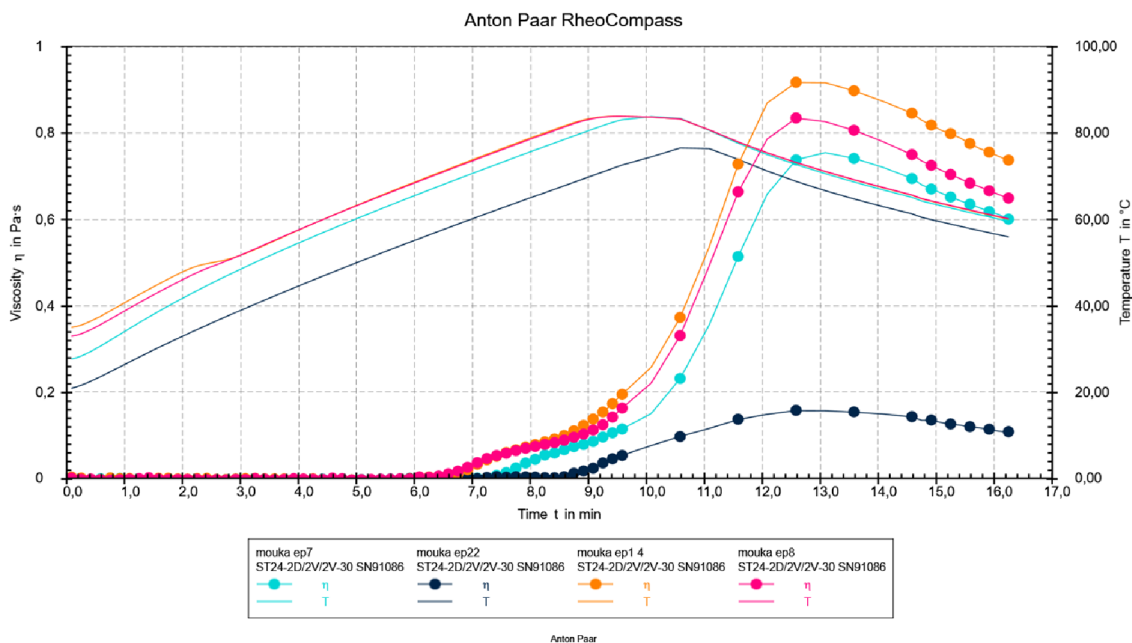
Obrázek 17 Výsledky RVA konvenčně pěstovaných vzorků jakostní skupiny C, kp 131 (Kalbex), kp 106 (LG Mocca), kp 128 3 (Mercedes), kp 104 (RGT Sacramento)



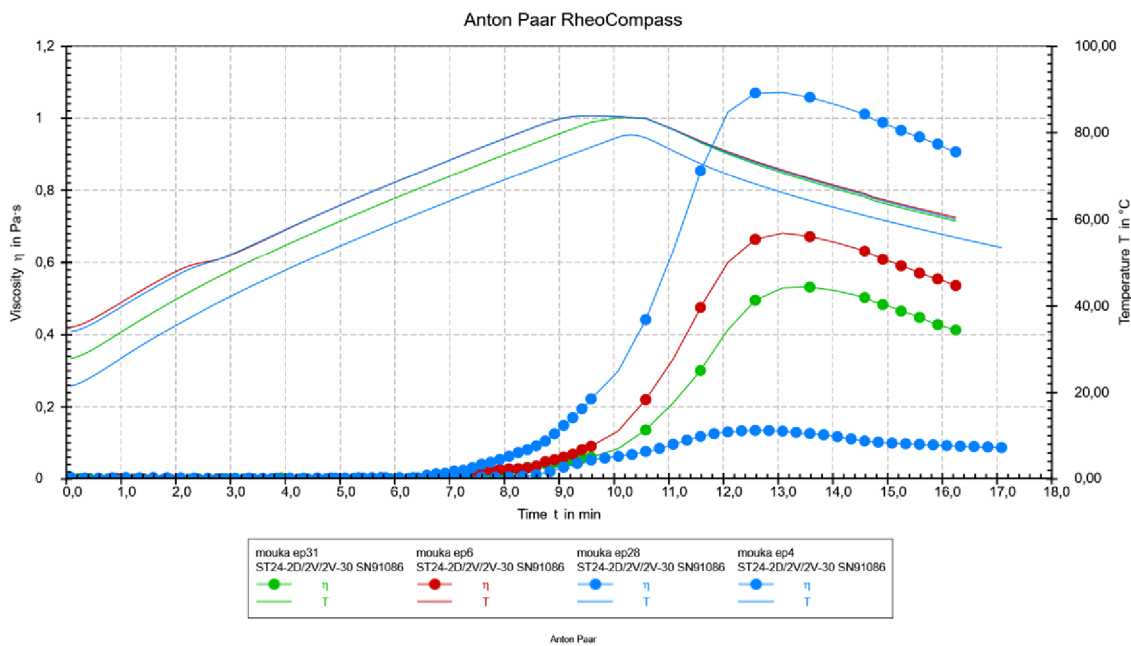
Obrázek 18 Výsledky RVA konvenčně pěstovaných vzorků jakostní skupiny B, kp 113 (Campesino), kp 115 (Nonstop), kp 125 (Steffi), kp 110 1 (KWS Donovan)



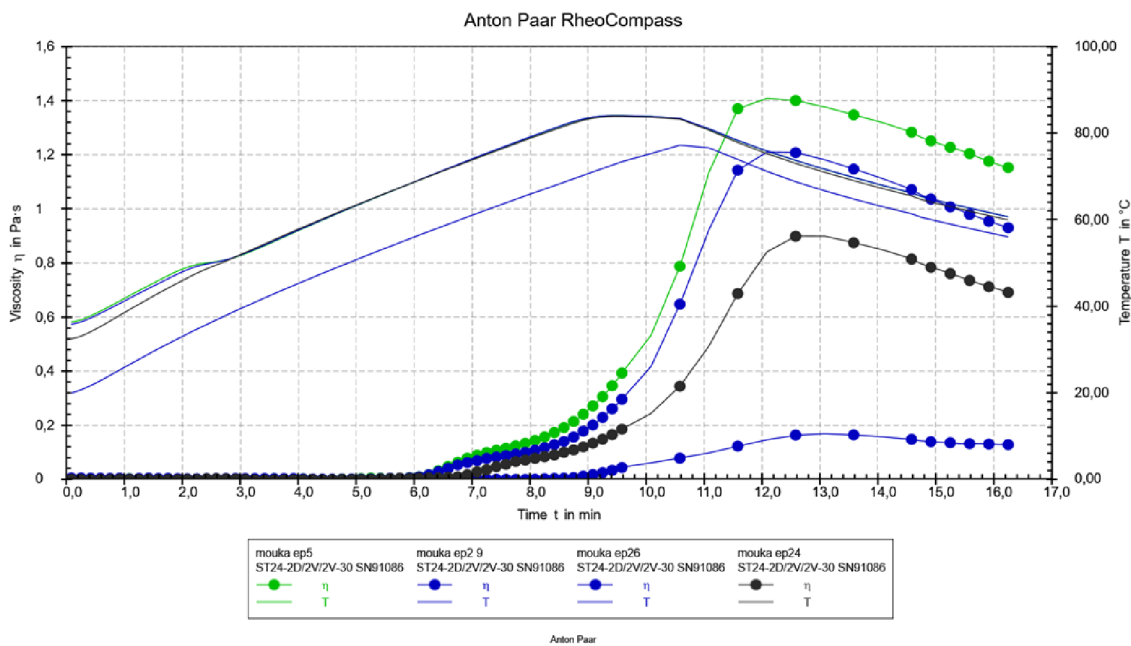
Obrázek 19 Výsledky RVA konvenčně pěstovaných vzorků jakostní skupiny E, kp 105 (Butterfly), kp 102 (Genius), kp 124 (Julie), kp 126 (Pirueta)



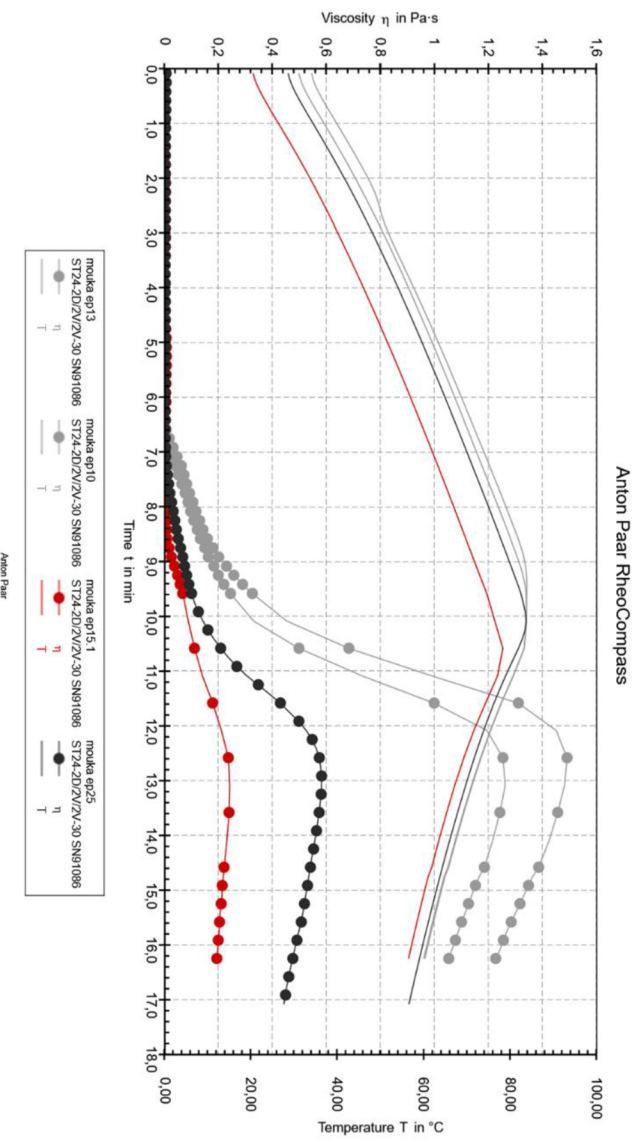
Obrázek 20 Výsledky RVA ekologicky pěstovaných vzorků jakostní skupiny A, ep 7 (Asory), ep 22 (Bohemia), ep 14 (Fakir), ep 8 (Illusion)



Obrázek 21 Výsledky RVA ekologicky pěstovaných vzorků jakostní skupiny C, ep 31 (Kalbex), ep 6 (LG Mocca), ep 28 (Mercedes), ep 4 (RGT Sacramento)



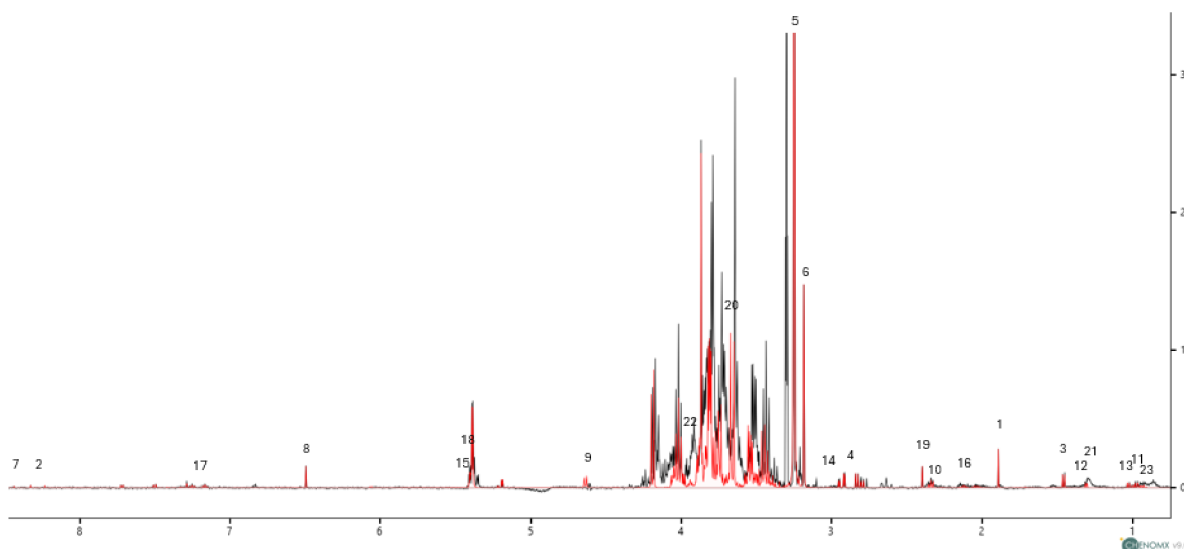
Obrázek 22 Výsledky RVA ekologicky pěstovaných vzorků jakostní skupiny E, ep 5 (Butterfly), ep 29 (Genius), ep 26 (Piruetta), ep 24 (Julie)



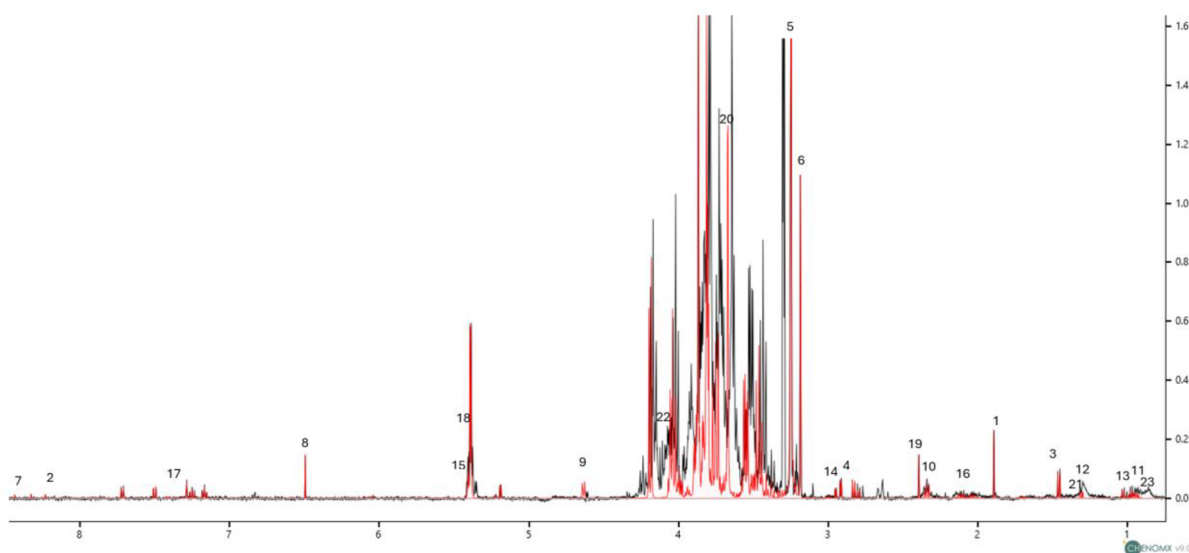
Obrázek 23 Výsledky RVA ekologicky pěstovaných vzorků jakostní skupiny B, ep 13 (Campesino), ep 10 (KWS Donovan), ep 15.1 (Nonstop), ep 25 (Steffi)

5.3 ^1H NMR

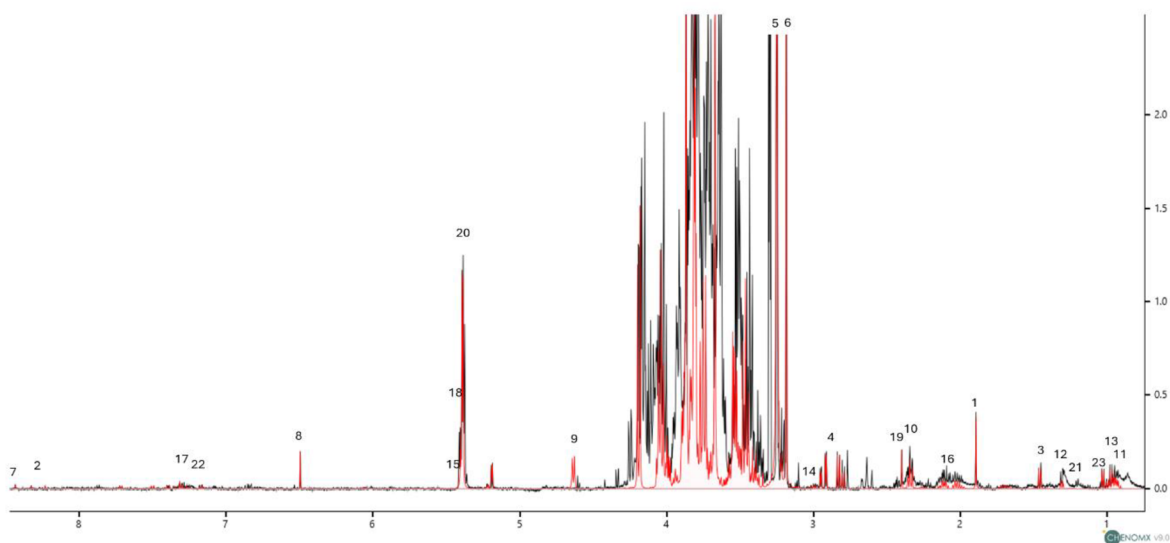
Metabolické profilování bylo provedeno pomocí ^1H NMR spektroskopie v programu Chenomx, která umožnila anotovat celkem 23 sloučenin. Spektrální data jsou znázorněna na obrázcích 24 až 27. Tyto obrázky ilustrují rozdíly v metabolických profilech mezi různými odrůdami a způsoby pěstování. Celkový seznam sloučenin a jejich chemické posuny jsou uvedeny v tabulce 18.



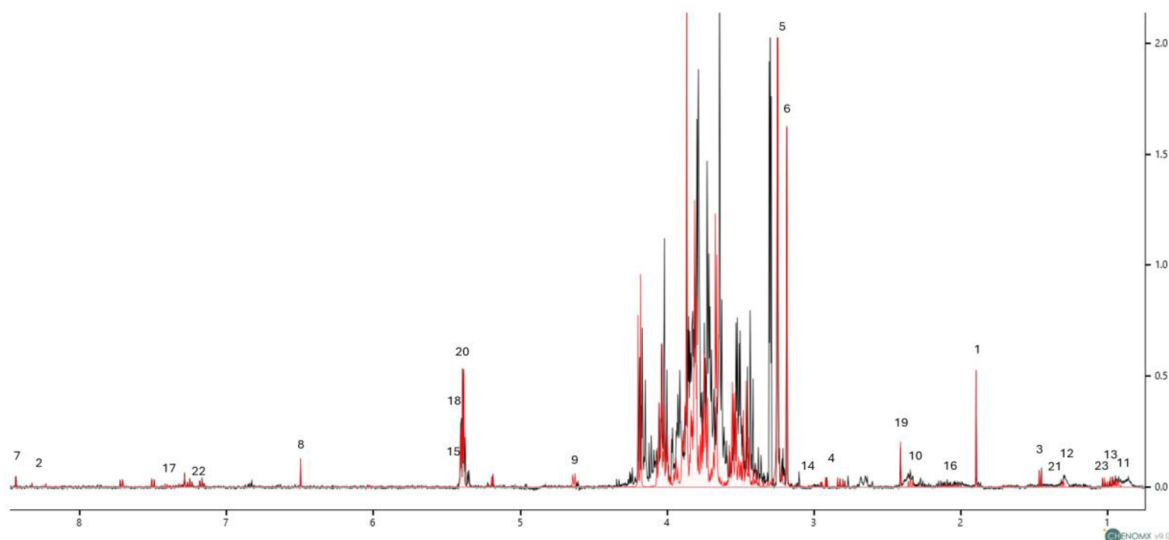
Obrázek 24 Spektrum odrůdy Asory (konvenční způsob pěstování), 1 acetát, 2 adenosin, 3 alanin, 4 asparagin, 5 betain, 6 cholin, 7 formát, 8 fumarát, 9 glukosa, 10 glutamát, 11 isoleucin, 12 laktát, 13 leucin, 14 lysin, 15 maltosa, 16 methionin, 17 fenylalanin, 18 rafinosa, 19 sukcinát, 20 sacharosa, 21 threonin, 22 tryptofan, 23 valin



Obrázek 25 Spektrum odrůdy Asory (ekologický způsob pěstování), 1 acetát, 2 adenosin, 3 alanin, 4 asparagin, 5 betain, 6 cholin, 7 formát, 8 fumarát, 9 glukosa, 10 glutamát, 11 isoleucin, 12 laktát, 13 leucin, 14 lysin, 15 maltosa, 16 methionin, 17 fenylalanin, 18 rafinosa, 19 sukcinát, 20 sacharosa, 21 threonin, 22 tryptofan, 23 valin



Obrázek 26 Spektrum odrůdy Kernza 703 (ekologický způsob pěstování), 1 acetát, 2 adenosin, 3 alanin, 4 asparagin, 5 betain, 6 cholin, 7 formát, 8 fumarát, 9 glukosa, 10 glutamát, 11 isoleucin, 12 laktát, 13 leucin, 14 lysin, 15 maltosa, 16 methionin, 17 fenylalanin, 18 rafinosa, 19 sukcinát, 20 sacharosa, 21 threonin, 22 tryptofan, 23 valin



Obrázek 27 Spektrum odrůdy Serpentin (ekologický způsob pěstování), 1 acetát, 2 adenosin, 3 alanin, 4 asparagin, 5 betain, 6 cholin, 7 formát, 8 fumarát, 9 glukosa, 10 glutamát, 11 isoleucin, 12 laktát, 13 leucin, 14 lysin, 15 maltosa, 16 methionin, 17 fenylalanin, 18 rafinosa, 19 sukcinát, 20 sacharosa, 21 threonin, 22 tryptofan, 23 valin

Tabulka 18 Seznam všech anotovaných sloučenin a jejich hodnota chemického posunu

Sloučenina	Chemický posun (ppm)
Acetát	1,9
Adenosin	8,3; 8,2; 6,1; 4,8; 4,4; 4,3; 3,9; 3,8
Alanin	3,8; 1,5
Asparagin	7,6; 6,9; 4,0; 2,9; 2,8
Betain	3,9; 3,3
Cholin	4,1; 3,5; 3,2
Formát	8,4
Fumarát	6,5
Glukosa	5,2; 4,6; 3,9; 3,8; 3,7; 3,5; 3,4; 3,2
Glutamát	3,7; 2,4; 2,3; 2,1; 2,0
Isoleucin	3,7; 2,0; 1,5; 1,2; 1,0; 0,9
Laktát	4,1; 1,3
Leucin	3,7; 1,7; 1,0; 0,9
Lysin	3,7; 3,0; 1,9; 1,7; 1,5; 1,4
Maltosa	5,4; 5,2; 3,9; 3,8; 3,7; 3,6; 3,4; 3,3
Methionin	3,8; 2,6; 2,1
Fenylalanin	7,4; 7,3; 4,0; 3,3; 3,1
Rafinosa	5,4; 4,2; 4,0; 3,9; 3,8; 3,7; 3,6
Sukcinát	2,4
Sacharosa	5,4; 4,2; 4,0; 3,9; 3,8; 3,7; 3,6; 3,5; 3,4
Threonin	4,2; 3,6; 1,3
Tryptofan	10,2; 7,7; 7,5; 7,3; 7,2; 4,0; 3,5; 3,3
Valin	3,6; 2,3; 1,0;

5.4 Statistická analýza

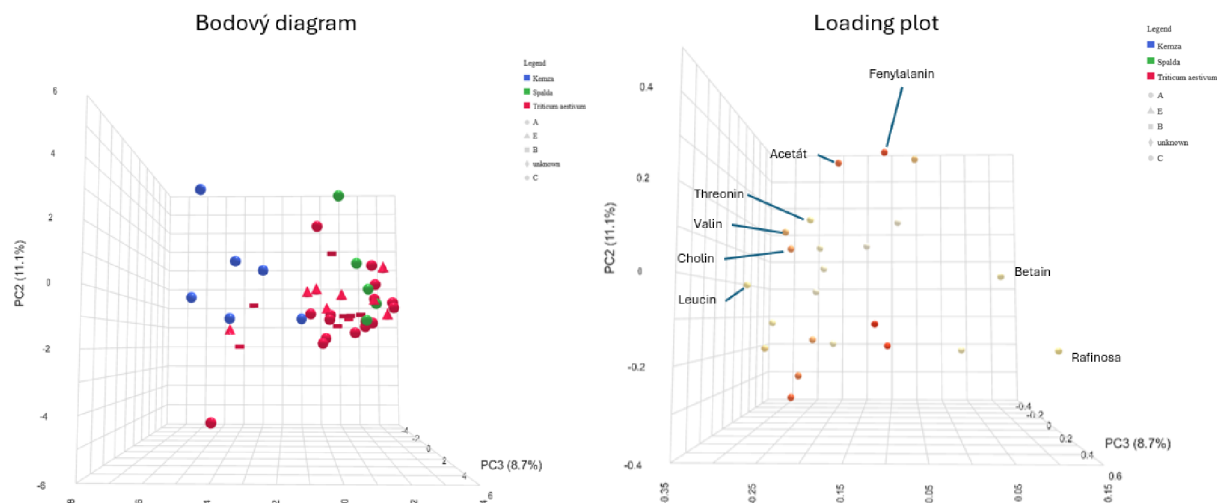
Na obrázku 28 jsou prezentovány výsledky PCA analýzy, která byla aplikována na data získaná pomocí ^1H NMR spektroskopie pro tři druhy obilovin: *Triticum aestivum*, kernza a špalda. *Triticum aestivum* bylo rozděleno do jakostních skupin A, B, C a E.

Bodový diagram zobrazuje rozptýlení vzorků těchto obilovin v trojrozměrném prostoru PCA, kde osy PC1, PC2 a PC3 reprezentují hlavní komponenty ukazující největší variabilitu v datové sadě. Každý bod na diagramu představuje jednotlivý vzorek, přičemž je barevně odlišen a označen podle jeho druhu a příslušnosti k jakostní skupině. Rozptýlení bodů na těchto osách odhaluje chemické rozdíly mezi druhy a jakostními skupinami, s důrazem na oblasti, kde jsou body více koncentrované, což může signalizovat chemické podobnosti uvnitř jednotlivých skupin.

Loading plot ilustruje, jak jednotlivé metabolity (například acetát, leucin, valin) přispívají k celkové variabilitě dat zachycené pomocí PCA.

Z analýzy obou grafů vyplývá, že mezi běžnou pšenicí *Triticum aestivum*, kernzou a špaldou existují významné biochemické rozdíly, stejně tak mezi jednotlivými jakostními skupinami. Tyto poznatky jsou klíčové pro šlechtění a selekci odrůd, umožňují identifikovat

metabolické profily, které jsou spojeny s preferovanými vlastnostmi, jako jsou pekařská kvalita či nutriční hodnota.



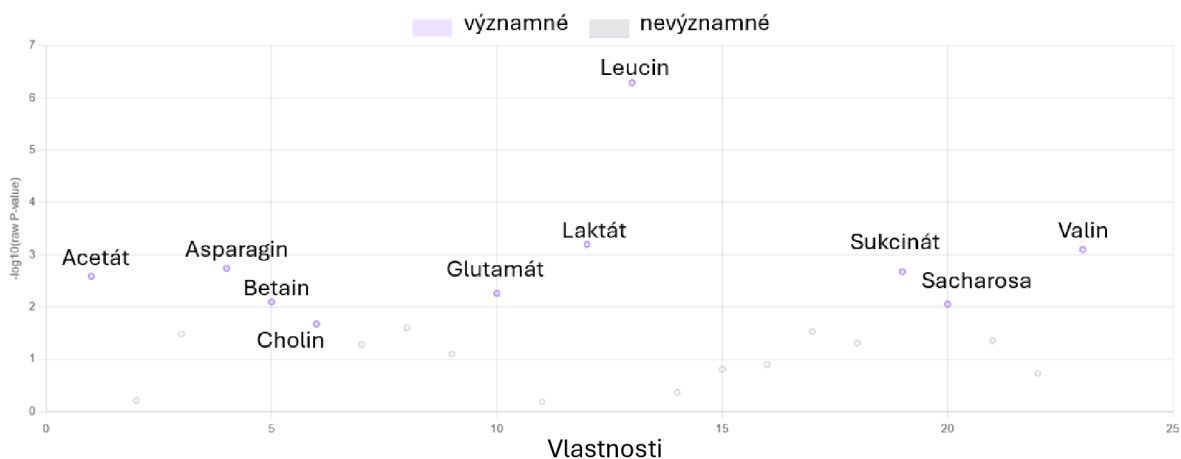
Obrázek 28 Bodový diagram a Loading plot získané z ^1H NMR výsledků

Výsledky získané pomocí ^1H NMR spektroskopie a zobrazené na vulkanovém grafu znázorněné na obrázku 29 odhalily statisticky významné metabolity v mouce extrahované v roztoku $\text{D}_2\text{O}-\text{CD}_3\text{OD}$ (80:20, w/v). Tento graf zobrazuje metabolity, jejichž koncentrace se statisticky významně liší, což bylo určeno pomocí jednofaktorové ANOVA s prahovou hodnotou $p \leq 0,05$.

Na grafu jsou metabolity jako např. leucin, acetát a asparagin zvýrazněny modrou barvou a identifikovány jako statisticky významné, což naznačuje, že jejich koncentrace se liší mezi zkoumanými vzorky mouky. Naopak metabolity označené černou barvou nebyly v analýze shledány jako statisticky významné, a tedy nevykazují významné rozdíly v koncentraci mezi skupinami vzorků.

Významnost jednotlivých metabolitů je na grafu reprezentována na ose y, která je označena jako $-\log_{10}$ (p-hodnota). Vyšší hodnoty na této ose indikují nižší p-hodnoty, což znamená vyšší statistickou významnost.

Tento graf poskytuje užitečný přehled o metabolitech, které mohou mít biologický a pekařský význam, založený na jejich rozdílné koncentraci v různých vzorcích mouky.



Obrázek 29 Statisticky významné metabolity

V tabulce 19 jsou analyzované koncentrace různých metabolitů, jako jsou leucin, laktát a valin, získaných pomocí ^1H NMR spektroskopie z různých druhů a odrůd obilovin. Statistické výsledky prezentované v tabulce odhalují klíčové rozdíly mezi skupinami.

F-hodnoty z F-testu reflektují míru variability mezi skupinami v porovnání s variabilitou uvnitř skupin pro každý analyzovaný metabolit. Vyšší F-hodnoty indikují značné rozdíly mezi skupinami. P-hodnoty pak poskytují informace o statistické významnosti těchto rozdílů. Hodnoty nižší než 0.05 obvykle naznačují, že pozorované rozdíly nejsou způsobeny náhodou. K lepší vizualizaci statistické významnosti slouží transformovaná p-hodnota $-\log_{10}(p)$, kde vyšší hodnoty tohoto ukazatele značí nižší p-hodnoty a tím vyšší statistickou významnost.

Další korekce, jako je míra falešného objevu (FDR), pomáhá minimalizovat počet falešně pozitivních závěrů. Hodnoty FDR nižší než 0.05 nebo 0.1 potvrzují, že zjištěné rozdíly jsou statisticky významné i po zohlednění rizika falešných objevů.

Závěrem, p-hodnoty a FDR uvedené ve sloupci naznačují, že některé metabolity, jako leucin a laktát, mají statisticky významné rozdíly mezi druhy obilovin, jako je špalda ve srovnání s kernzou nebo pšenicí setou (*Triticum aestivum*).

Tabulka 19 Rozdíly v metabolitech získané z ¹H NMR

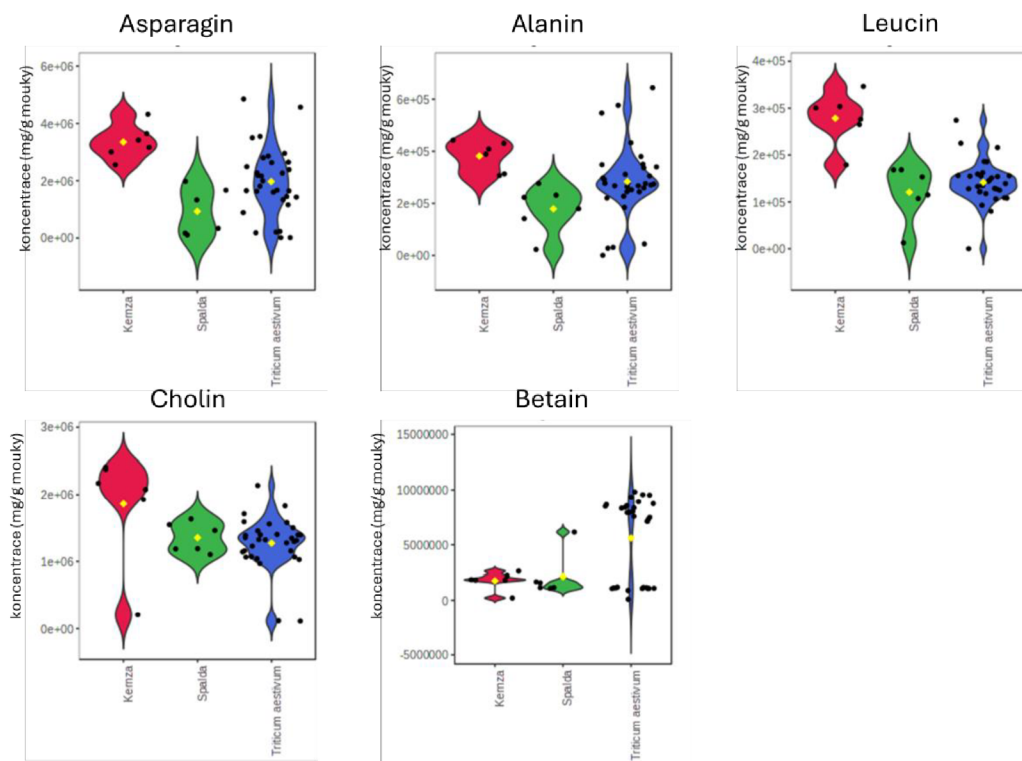
Název	F-hodnota	P-hodnota	-log ₁₀ (p)	FDR	Post-hoc testy
Leucin	21.051	5.13e-7	6.2899	1.18e-5	Špalda-Kernza; <i>Triticum aestivum</i> - Kernza
Laktát	8.8558	6.36e-4	3.1968	0.0061472	Špalda-Kernza; <i>Triticum aestivum</i> - Kernza
Valin	8.5252	8.02e-4	3.0959	0.0061472	Špalda-Kernza; <i>Triticum aestivum</i> - Kernza
Asparagin	7.3807	0.001829	2.3738	0.009705	Špalda-Kernza; <i>Triticum aestivum</i> - Kernza
Sukcinát	7.1872	0.0021098	2.6758	0.009705	Špalda-Kernza; <i>Triticum aestivum</i> - Špalda
Acetát	6.9116	0.00259	2.5867	0.0099283	<i>Triticum aestivum</i> - Kernza; <i>Triticum</i> <i>aestivum</i> -Špalda
Glutamát	5.9274	0.0054806	2.2612	0.018008	Špalda-Kernza; <i>Triticum aestivum</i> - Kernza
Betain	5.442	0.0080149	2.0961	0.022622	<i>Triticum aestivum</i> - Kernza
Sacharosa	5.3166	0.0088519	2.053	0.022622	<i>Triticum aestivum</i> - Kernza
Cholin	4.2408	0.021183	1.674	0.048721	<i>Triticum aestivum</i> - Kernza

Na obrázku 30 a 31 jsou prezentovány výsledky získané pomocí ¹H NMR spektroskopie, které ilustrují distribuci statisticky významných metabolitů v obilovinách jako je kernza, špalda a *Triticum aestivum* (pšenice setá). Každý z grafů znázorňuje distribuci koncentrace jednoho specifického metabolitu napříč zkoumanými druhy obilovin.

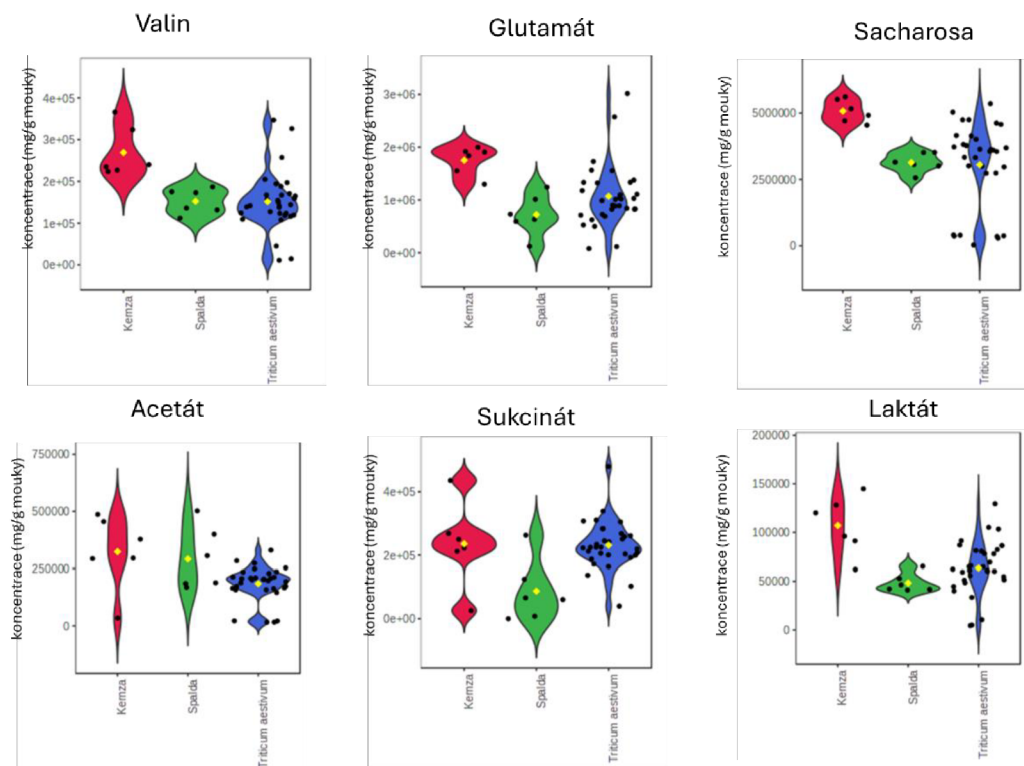
Grafy poskytují názornou vizualizaci rozložení dat, přičemž tvar každého grafu ukazuje, jak jsou data distribuována. Širší části grafu signalizují oblasti s vyšší hustotou vzorků, což naznačuje, že v těchto oblastech se vyskytuje více datových bodů. Naopak úzké špičky na koncích grafu reprezentují extrémní hodnoty, které se vyskytují méně často. Bodové značky na grafu zobrazují jednotlivé naměřené hodnoty pro každou obilovinu, což umožňuje podrobnější porovnání a lépe ilustruje rozdíly mezi jednotlivými vzorky.

Analýza těchto grafů ukazuje zajímavé vzorce. Například, distribuce asparaginu a alaninu je podobná mezi všemi třemi typy obilovin, zatímco koncentrace leucinu vykazuje výrazné rozdíly mezi nimi, což je zvýrazněno pomocí horizontálních čar indikujících statisticky významné rozdíly. Metabolity jako betain a sacharosa pak vykazují největší variabilitu mezi vzorky, což naznačuje rozdíly v metabolických profilech.

Tyto nálezy mají důležité implikace pro pochopení metabolických profilů různých druhů obilovin a jejich potenciálních nutričních a pekařských vlastností. Vyšší koncentrace některých aminokyselin by mohla být spojena s lepší kvalitou lepku nebo větší odolností obilovin proti určitým zpracovatelským procesům, což je klíčové pro šlechtění a výběr obilovin s optimálními vlastnostmi pro specifické použití.



Obrázek 30 Rozdíly mezi vzorky v koncentracích statisticky významných metabolitů



Obrázek 31 Rozdíly mezi vzorky v koncentracích statisticky významných metabolitů

6 Diskuse

V diskusi je porovnáván vliv pekařské kvality pšenice a metabolitů identifikovaných pomocí ^1H NMR spektroskopie na základě výsledků získaných z experimentální části a srovnání s daty z dříve publikovaných studií.

Výzkum identifikoval významné metabolity, jako je leucin, acetát nebo asparagin, které mají rozdílné koncentrace mezi zkoumanými vzorky. Tato zjištění lze srovnat s daty z výzkumu, který publikovali Baker et al. (2006), kde byla vyhodnocována genetická modifikace pšenice a její dopad na metabolický profil. Získaná data ukazují podobné trendy v rozložení těchto metabolitů, což naznačuje, že určité metabolity mají konzistentní vliv na pekařskou kvalitu napříč různými odrůdami a typy pěstování.

V experimentální části práce bylo identifikováno několik klíčových metabolitů jako jsou leucin, acetát a asparagin, které mají zásadní vliv na pekařskou kvalitu pšenice. Tyto metabolity se objevily ve variabilních koncentracích v různých vzorcích a jejich úloha v určování kvality pekařských produktů je důležitá.

Leucin, jako esenciální aminokyselina, se podílí na regulaci klíčových enzymů, které ovlivňují fermentační procesy v těstu. Jeho přítomnost může ovlivnit rychlost kynutí a také rozvoj objemu těsta. Acetát, který je produktem fermentačního procesu, hraje důležitou roli v zakysání těsta. Pomáhá regulovat pH těsta a tím ovlivňuje aktivitu enzymů a kvasinek. Tento proces zakysání přispívá k zesílení a zlepšení struktury těsta tím, že stabilizuje lepkovou síť. Asparagin je důležitý pro vznik akrylamidu během pečení, což je významný aspekt z hlediska bezpečnosti a kvality potravin. Při vysokých teplotách reaguje asparagin s redukujícími sacharidy a dochází ke vzniku akrylamidu, což je látka, která negativně ovlivňuje zdravotní nezávadnost pekařských výrobků (Rosell 2011; Chen et al. 2016; Oddy et al. 2022).

Z dat ^1H NMR spektroskopie je patrné, že ekologicky pěstované odrůdy pšenice vykazovaly odlišné metabolické profily ve srovnání s konvenčně pěstovanými odrůdami. Konkrétně byl leucin identifikován jako jeden z metabolitů, jehož koncentrace se významně liší mezi ekologickými a konvenčními vzorky, což naznačuje, že metody ekologického pěstování mohou podporovat jeho vyšší koncentrace v zrně. Tento poznatek může mít zásadní vliv na kvalitu pečiva. Vyšší obsah leucinu v ekologicky pěstovaných vzorcích by tak mohl přispívat k lepšímu vývoji lepkové sítě a tím i k lepší textuře pečiva, což je zásadní pro kvalitu finálních pekařských výrobků.

Koncentrace acetátu se také liší v závislosti na způsobu pěstování pšenice. Acetát, jako produkt fermentačního procesu, byl ve vyšších koncentracích zjištěn ve vzorcích pšenice pěstované ekologicky ve srovnání s konvenčním způsobem pěstování. Toto zjištění může mít významný dopad na pekařské postupy, protože vyšší hladiny acetátu mohou zlepšovat zakysání těsta, které je klíčové pro optimalizaci kynutí a rozvoj těsta. Regulace pH těsta pomocí acetátu napomáhá stabilizovat lepkovou síť, což může vést k lepší textuře a struktuře pečiva.

Výsledky ukazují, že i koncentrace asparaginu se liší v závislosti na způsobu pěstování pšenice. Vzorky z ekologického způsobu pěstování měly tendenci obsahovat nižší hladiny asparaginu ve srovnání s konvenčně pěstovanými vzorky. Toto je zásadní zjištění, protože asparagin je známý svou rolí v procesu tvorby akrylamidu při vysokoteplotním

zpracování, jako je pečení. Nižší hladiny asparaginu mohou potenciálně snižovat riziko tvorby akrylamidu.

Důraz na studii metabolitů jako leucinu, acetátu a asparaginu, které hrají roli v procesech jako je fermentace a formování lepkové sítě, pomáhá objasnit, jak tyto sloučeniny přispívají k textuře, chuti a nutriční hodnotě finálních pekařských výrobků.

Další statisticky významný metabolit je betain, který pomáhá udržet vodu v těstě a tím zlepšuje jeho manipulaci a výslednou texturu. Betain může také stabilizovat enzymy a zlepšit fermentační proces. Podle Filipčev et al. (2018) betain představuje bioaktivní sloučeninu, která má významné fyziologické funkce v lidském organismu jako osmolit a donor methylových skupin pro řadu biochemických procesů. Jako takový je nezbytný pro zachování zdraví ledvin, jater a srdce. Tato sloučenina má důležitou roli v prevenci a léčbě mnoha chronických onemocnění, mezi nimiž se největší pozornosti dostalo snížení plazmatických hladin homocysteinu. Hlavním zdrojem betainu jsou obiloviny a mlýnské výrobky. Data ukazují, že vyšší hladiny betainu byly identifikovány v ekologicky pěstovaných vzorcích pšenice ve srovnání s konvenčně pěstovanými vzorky. Tento trend byl konzistentní jak u špaldy, tak u kernzy, s tím, že ekologické způsoby pěstování obou těchto druhů obilovin přispěly k vyšším koncentracím betainu.

Další statisticky významným metabolitem je cholin, který přispívá k udržení strukturální integrity buněk v těstě a může podporovat lepší vzdušnost a objem pečiva. Glutamát jako stimulant chuti může zlepšit chuťové vlastnosti pekařských výrobků a současně působit jako přenašeč dusíku, což ovlivňuje fermentaci a vývoj těsta. Laktát, který je produktem kvašení může zvyšovat kyselost těsta, a tím pozitivně ovlivňuje jeho strukturu a stabilitu, stejně jako zlepšuje trvanlivost pečiva. Sukcinát může hrát roli ve vylepšení chuťového profilu a ve fermentačních procesech, to může vést k lepšímu objemu a struktuře těsta. Sacharosa ovlivňuje Maillardovu reakci během pečení, která vede k lepší barvě a chuti pečiva. Další esenciální aminokyselina valin může ovlivnit enzymatické procesy v těstě a přispívat k lepší struktuře těsta.

Zjištění ukázala, že ekologicky pěstované vzorky pšenice často obsahují vyšší koncentrace těchto metabolitů ve srovnání s konvenčně pěstovanými vzorky. To naznačuje, že ekologické pěstování může podporovat bohatší metabolický profil, což může přinést výhody v podobě lepších sensorických a strukturálních vlastností pekařských výrobků. Toto pozorování podporuje myšlenku, že ekologické pěstitelské metody, které omezují použití syntetických hnojiv a pesticidů, mohou vést k produkci pšenice s nutričně výhodnějším složením. Ovšem je důležité zdůraznit, že ekologický způsob pěstování má kvůli nepoužívání N-hnojiv a pesticidů nižší výnos na hektar (Gabriel et al. 2013).

Studie Curtis TY et al. (2009) podtrhuje, jak genetické a environmentální faktory ovlivňují metabolický profil pšenice, což má přímý dopad na její pekařské vlastnosti. Výsledky, zvláště rozdíly mezi ekologicky a konvenčně pěstovanými vzorky, ukazují, že environmentální faktory mohou značně modifikovat obsah klíčových metabolitů, což ovlivňuje finální kvalitu produktu.

Tyto poznatky poskytují důležitý kontext pro šlechtění a pěstování pšenice, kde může být cílené zaměření na genetické a environmentální faktory klíčové pro optimalizaci pekařských vlastností a bezpečnosti potravin. Porozumění komplexním interakcím mezi genetickými a environmentálními faktory, které ovlivňují metabolický profil pšenice, je nezbytné pro vývoj odrůd, které jsou nejen nutričně hodnotnější a bezpečnější, ale také schopné vyhovět požadavkům na kvalitu pečiva v moderním potravinářství.

Analýza ^1H NMR poskytla důležité informace o tom, jak se metabolické profily liší mezi odrůdami pšenice pěstovanými různými způsoby. Výzkum Graham SF et al. (2009) se zaměřuje na variabilitu v metabolických profilech pšenice na evropské úrovni a nabízí porovnání, které pomáhá pochopit, jak regionální rozdíly ovlivňují pekařské charakteristiky. Získaná data podporují tuto tezi, která ukazuje, že i drobné rozdíly v metabolickém spektru mohou mít významný dopad na kvalitu pečiva.

Výzkum uveřejněný Nurani et al. (2021) zdůrazňuje efektivitu ^1H NMR spektroskopie pro autentizaci rostlinných druhů, včetně léčivých bylin. Při využití metody PCA byly úspěšně vytvořeny prediktivní modely pro určení pravosti rostlin. Tato studie dokládá, že kombinace ^1H NMR spektroskopie a chemometrických technik představuje slibný přístup k autentizaci a kontrole kvality zemědělských produktů.

Dále je důležité zmínit, že špalda vykazuje rozdíly ve svém metabolickém profilu ve srovnání s pšenicí setou. Tyto rozdíly mají přímý dopad na pekařské vlastnosti a nutriční hodnotu špaldy, což bylo zjištěno prostřednictvím detailní analýzy jejího metabolického spektra. Tento nálezný význam pro autenticitu a kvalitu špaldových výrobků, jelikož umožňuje efektivní detekci falšování, což je klíčové pro zajištění pravosti a ochranu spotřebitelů.

Studie Pastor et al. (2022) se zaměřuje na autentizaci tradičních a kvašených chlebů a poskytuje ucelený přehled možností ověření pravosti, čímž podtrhuje význam pokročilých analytických technik pro potravinářský průmysl. Bönick, Huschek a Rawel (2017) se věnují konkrétní metodě identifikace pšenice, žita a špaldy v pekařských výrobcích pomocí peptidových biomarkerů, což dokládá efektivitu cílené proteomické analýzy pro ověření pravosti obilovin.

Studie Šerban et al. (2023) zkoumá metabolické profily starých druhů pšenice kvašené pomocí kmenů *Lactiplantibacillus plantarum*, což naznačuje, že i tradiční kultivary, jako je špalda, mohou mít specifické fermentační charakteristiky přínosné pro pekařskou kvalitu.

Tato zjištění podporují možnost využití metabolického profilování nejen pro kontrolu autenticity, ale i pro zlepšení výrobních postupů a kvality pekařských výrobků. Integrace moderních analytických technik a pokročilých metod chemometrie do pekařského průmyslu nabízí nové možnosti pro zajištění vysoké kvality a autenticity potravinářských produktů. Tento přístup může vést k významnému pokroku v oblasti potravinové bezpečnosti a kvality, a zároveň poskytovat podklady pro další vědecký výzkum v této dynamicky se vyvíjející oblasti.

Výzkum publikovaný Amargianitaki & Spyros (2017) ve vinařství poukazuje na význam ^1H NMR spektroskopie pro identifikaci a kvantifikaci organických složek ve víně. Studie ukázala, že ^1H NMR je vhodná i pro měření obsahu octové kyseliny a detekci

oxidativního zkažení vín, což podtrhuje užitečnost NMR spektroskopie pro hodnocení jakosti výrobků bez předchozí přípravy vzorku.

Tyto poznatky naznačují, že ^1H NMR spektroskopie může být efektivním nástrojem nejen pro kontrolu kvality a autentizaci produktů, ale také pro predikci pekařské kvality obilovin a mlýnských výrobků.

7 Závěr

Diplomová práce systematicky zkoumala vztah mezi pekařskou kvalitou pšenice a metabolickým profilem, který byl identifikován prostřednictvím techniky ^1H NMR spektroskopie.

Výzkum ukázal, že rozdílné pěstební techniky mohou ovlivňovat hladiny klíčových metabolitů, jako jsou asparagin, leucin a acetát, které mají přímý vliv na pekařské vlastnosti pšenice. Bylo zjištěno, že ekologický způsob pěstování podporuje vyšší hladiny leucinu a acetátu, jež mohou přispívat k lepší strukturální a sensorické kvalitě pečiva. Dále bylo prokázáno, že nižší hladiny asparaginu ve vzorcích z ekologického způsobu pěstování mohou potenciálně snižovat riziko tvorby akrylamidu během pečení, což je důležité pro bezpečnost a zdravotní nezávadnost potravin.

Práce rovněž ukázala, že špalda vykazuje značné rozdíly ve svém metabolickém profilu ve srovnání s pšenicí setou, což má přímý dopad na její pekařské vlastnosti a nutriční hodnotu. Možnost detekce falšování špaldy prostřednictvím analýzy jejího metabolického spektra je klíčová pro zajištění autenticity a kvality prodávaných výrobků. Zjištění, že rozdílné pěstební metody ovlivňují reologické vlastnosti pšenice, což bylo ověřeno metodou RVA ethanol, má přímý dopad na výrobní procesy v pekárenském průmyslu.

Z výsledků této práce vyplývá, že detailní pochopení metabolického spektra pšenice může mít významné dopady na šlechtění nových odrůd, které jsou optimalizované pro specifické využití v pekárenském průmyslu a pro zlepšení nutričních vlastností pšenice. Tento poznatek otevírá nové možnosti pro pekárenský průmysl, aby se zaměřil na výběr surovin, které podporují nejen kvalitu, ale i zdravotní nezávadnost konečných výrobků.

Z těchto poznatků si lze vzít ponaučení o významu integrace moderních analytických technik do tradičních agronomických praxí, což umožní efektivnější a cílenější šlechtění odrůd s požadovanými vlastnostmi. Tento integrovaný přístup může vést k produkci potravin vyšší kvality, které lépe vyhovují nutričním a bezpečnostním standardům moderní společnosti.

Studie umožnily potvrdit hypotézu, že pekařskou kvalitou obilovin a mlýnských výrobků lze předpovědět na základě ^1H NMR profilu spektra. Bylo zjištěno, že specifické metabolity, jako jsou leucin, acetát a asparagin, mají zásadní vliv na kvalitu pšenice a jejích zpracovaných produktů.

8 Literatura

- Amargianitaki M, Spyros A. 2017. NMR-based metabolomics in wine quality control and authentication. *Chemical and Biological Technologies in Agriculture* **4**: 9.
- Arendt EK, Zannini E. 2013. *Cereal grains for the food and beverage industries*. Woodhead publishing, Oxford
- Armaninoa C, Festab MR. 1996. Analytica chimica acta elsevier Characterization of wheat by four analytical parameters. A chemometric study. In *Analytica Chimica Acta* (Vol. 331).
- Bacher F, Aguzzoni A, Chizzali S, Pignotti E, Puntischer H, Zignale P, Voto G, Tagliavini M, Tirler W, Robatscher P. 2023. Geographic tracing of cereals from South Tyrol (Italy) and neighboring regions via $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ isotope analysis. *Food Chemistry* **405**: 134890.
- Baker JM, Hawkins ND, Ward JL, Lovegrove A, Napier JA, Shewry PR, Beale MH. 2006. A metabolomic study of substantial equivalence of field-grown genetically modified wheat. *Plant Biotechnology Journal* **4**: 381–392.
- Belcar J, Sobczyk A, Sobolewska M, Stankowski S, Gorzelany J. 2020. Characteristics of Technological Properties of Grain and Flour from Ancient Varieties of Wheat (Einkorn, Emmer and Spelt). *Acta Universitatis Cibiniensis. Series E: Food Technology* **24**: 269–278.
- Biel W, Stankowski S, Jaroszevska A, Pużyński S, Boško P. 2016. The influence of selected agronomic factors on the chemical composition of spelt wheat (*Triticum aestivum* ssp. *spelta* L.) grain. *Journal of Integrative Agriculture* **15**: 1763–1769.
- Bönick J, Huschek G, Rawel H. 2017. Determination of wheat, rye and spelt authenticity in bread by targeted peptide biomarkers. *Journal of Food Composition and Analysis* **58**
- Bonilla JC, Erturk MY, Schaber JA, Kokini JL. 2020. Distribution and function of LMW glutenins, HMW glutenins, and gliadins in wheat doughs analyzed with ‘in situ’ detection and quantitative imaging techniques. *Journal of Cereal Science* **93**: 102931.
- Branlard G. 2009. *Gluten proteins 2009*. Proceedings of the 10th International Gluten workshop.
- Caldelas C, Rezzouk FZ, Aparicio Gutiérrez N, Diez–Fraile MC, Araus Ortega JL. 2023. Interaction of genotype, water availability, and nitrogen fertilization on the mineral content of wheat grain. *Food Chemistry* **404**: 134565.

- Cao Y, Zhang J, Wang R, Sun H, Yan Y. 2022. Molecular Characterization and SNP-Based Molecular Marker Development of Two Novel High Molecular Weight Glutenin Genes from *Triticum spelta* L. *International Journal of Molecular Sciences* **23**.
- Capouchová I. 2001. "Technological quality of spelt (*Triticum spelta* L.) from ecological growing system." 307-322.
- Czuchajowska Z, Paszczynska B. 1996. Is Wet Gluten Good for Baking? **1**.
- ČSÚ. 2022. Osevní plochy ozimých plodin pro sklizeň v roce 2022. ČSÚ. Available from <https://www.czso.cz/csu/czso/osevni-plochy-ozimych-plodin-pro-sklizen-v-roce-2022> (accessed January 2022)
- de Almeida SS, da Costa GBM, Barreto MS, Freire DMG, Lobo LA, Domingues RMCP, Moura-Nunes N, Monteiro M, Perrone D. 2020. Bioaccessibility and gut metabolism of phenolic compounds of breads added with green coffee infusion and enzymatically bioprocessed. *Food Chemistry* **333**: 127473.
- Delcour J, Hosney R. 2010. Principles of Cereal Science and Technology. AACC Int 229–289.
- Dobraszczyk B J, Morgenstern MP. 2003. Rheology and the breadmaking process. *Journal of Cereal Science* **38**: 229–245.
- Don C, Lichtendonk W, Plijter JJ, Hamer RJ. 2003. Glutenin Macropolymer: a Gel Formed by Glutenin Particles. *Journal of Cereal Science* **37**: 1–7.
- Dvorak J, Deal KR, Luo MC, You FM, von Borstel K, Dehghani H. 2012. The Origin of Spelt and Free-Threshing Hexaploid Wheat. *Journal of Heredity* **103**: 426–441.
- Fardet A. 2010. New hypotheses for the health-protective mechanisms of whole-grain cereals: what is beyond fibre? *Nutrition Research Reviews* **23**: 65–134. <https://doi.org/DOI:10.1017/S0954422410000041>
- Filipčev B, Kojić J, Krulj J, Bodroža-Solarov M, Ilić N. 2018. Betaine in Cereal Grains and Grain-Based Products. *Foods* **7**.
- Gabriel D, Sait SM, Kunin WE, Benton TG. 2013. Food production vs. biodiversity: comparing organic and conventional agriculture. *Journal of Applied Ecology* **50**: 355–364.

- Gatti S, Rubio-Tapia A, Makharia G, Catassi C. 2024. Patient and Community Health Global Burden in a World with more Celiac Disease. *Gastroenterology*. DOI: 10.1053/j.gastro.2024.01.035
- Gebruers K, Dornez E, Boros D, Fraś A, Dynkowska W, Bedo Z, Rakszegi M, Delcour JA, Courtin CM. 2008. Variation in the content of dietary fiber and components thereof in wheats in the HEALTHGRAIN Diversity Screen. *Journal of agricultural and food chemistry* **56**: 9740–9749.
- Geisslitz S, Wieser H, Scherf KA, Koehler P. 2018. Gluten protein composition and aggregation properties as predictors for bread volume of common wheat, spelt, durum wheat, emmer and einkorn. *Journal of Cereal Science* **83**: 204–212.
- Goesaert H, Brijs K, Veraverbeke WS, Courtin CM, Gebruers K, Delcour JA. 2005. Wheat flour constituents: how they impact bread quality, and how to impact their functionality. *Trends in Food Science & Technology* **16**: 12–30.
- Gomez-Becerra HF, Erdem H, Yazici A, Tutus Y, Torun B, Ozturk L, Cakmak I. 2010. Grain concentrations of protein and mineral nutrients in a large collection of spelt wheat grown under different environments. *Journal of Cereal Science* **52**: 342–349.
- Grela ER. 1996. Nutrient Composition and Content of Antinutritional Factors in Spelt (*Triticum spelta* L.) Cultivars. *Journal of the Science of Food and Agriculture* **71**: 399–404.
- Guo J, Wang F, Zhang Z, Wu D, Bao J. 2021. Characterization of gluten proteins in different parts of wheat grain and their effects on the textural quality of steamed bread. *Journal of Cereal Science* **102**: 103368. DOI: 10.1016/j.jcs.2021.103368
- Harter C. 2019. Mit Glutenunverträglichkeit assoziierte Erkrankungen. In C. Harter (Ed.), *Glutenunverträglichkeit: Über Gluten-assoziierte Erkrankungen und den Sinn einer glutenfreien Ernährung* (pp. 27–36). Springer Fachmedien Wiesbaden. DOI: 10.1007/978-3-658-28163-2_4
- Hemminga MA. 1992. Introduction to NMR. *Trends in Food Science and Technology* **3**: 179–185
- Hidalgo A, Brandolini A. 2014. Nutritional properties of einkorn wheat (*Triticum monococcum* L.). *Journal of the science of food and agriculture*, **94**: 601–612.

- Huertas-García AB, Tabbita F, Alvarez JB, Sillero JC, Ibba MI, Rakszegi M, Guzmán C. 2023. Genetic Variability for Grain Components Related to Nutritional Quality in Spelt and Common Wheat. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. DOI: 10.1021/acs.jafc.3c02365
- Chantret N, Salse J, Sabot F, Rahman S, Bellec A, Laubin B, Dubois I, Dossat C, Sourdille P, Joudrier P, Gautier MF, Cattolico L, Beckert M, Aubourg S, Weissenbach J, Caboche M, Bernard M, Leroy P, Chalhou B. 2005. Molecular Basis of Evolutionary Events That Shaped the Hardness Locus in Diploid and Polyploid Wheat Species (*Triticum* and *Aegilops*). *The Plant Cell* **17**: 1033–1045.
- Chen XY, Levy C, Gänzle MG. 2016. Structure-function relationships of bacterial and enzymatically produced reuterans and dextran in sourdough bread baking application. *International Journal of Food Microbiology* **239**: 95–102.
- Jaroslav Prugar a kolektiv. 2008. Kvalita rostlinných produktů na prahu 3. tisíciletí.
- Kandić V, Nikolić V, Simić M, Žilić S, Stevanović M, Mandić D, Dodig D. 2023. Spelt wheat (*Triticum spelta*) and common bread wheat compared for nutritional contents and functional-technological properties. *Chilean Journal of Agricultural Research* **83**: 146–158.
- Kema GHJ. 1992. Resistance in spelt wheat to yellow rust. *Euphytica* **63**: 225–231.
- Knapowski T, Kozera W, Chmielewski J, Gorczyca D, Wszelaczyńska E, Pobereźny J. 2016. Mineral fertilization as a factor determining technological value of grain of ssp. L. *Environmental Protection and Natural Resources* **27**: 8–13.
- Kniese J, Race AM, Schmidt H. 2021. Classification of cereal flour species using Raman spectroscopy in combination with spectra quality control and multivariate statistical analysis. *Journal of Cereal Science* **101**: 103299. DOI: 10.1016/j.jcs.2021.103299
- Koenig A, Konitzer K, Wieser H, Koehler P. 2015. Classification of spelt cultivars based on differences in storage protein compositions from wheat. *Food Chemistry* **168**: 176–182.
- Konvalina P, Bradová J, Capouchova I, Stehno Z, Sr J. 2012. Baking quality and high molecular weight glutenin subunit composition of Emmer wheat, old and new varieties of bread wheat. *Romanian Agricultural Research* **30**: 83–89.
- Košir IJ, Kidrič J. 2002. Use of modern nuclear magnetic resonance spectroscopy in wine analysis: determination of minor compounds. *Analytica Chimica Acta* **458**: 77–84.

- Kulathunga J, Reuhs BL, Simsek S. 2020. A review: Novel trends in hulled wheat processing for value addition. *Trends in Food Science & Technology* **106**: 232–241.
- Kupriyanova G, Smirnov M, Mershev I, Maraşlı A, Okay C, Mozzhukhin G, Rameev B. 2024. Comparative analysis of vegetable oils by ¹H NMR in low and high magnetic fields. *Journal of Food Composition and Analysis* **126**: 105877. DOI: 10.1016/j.jfca.2023.105877
- Lamba K, Kumar M, Singh V, Chaudhary L, Sharma R, Yashveer S, Dalal MS. 2023. Heat stress tolerance indices for identification of the heat tolerant wheat genotypes. *Scientific Reports* **13**. DOI: 10.1038/s41598-023-37634-8
- LI G, CHEN Y, DING Y, GENG C, LI Q, LIU Z, WANG S, TANG S. 2016. Charactering protein fraction concentrations as influenced by nitrogen application in low-glutelin rice cultivars. *Journal of Integrative Agriculture* **15**: 537–544.
- Li HT, Kerr ED, Schulz BL, Gidley MJ, Dhital S. 2022. Pasting properties of high-amylose wheat in conventional and high-temperature Rapid Visco Analyzer: Molecular contribution of starch and gluten proteins. *Food Hydrocolloids* **131**: 107840. DOI: 10.1016/j.foodhyd.2022.107840
- Li R, Wang D, Zhu B, Liu T, Sun C, Zhang Z. 2022. Estimation of nitrogen content in wheat using indices derived from RGB and thermal infrared imaging. *Field Crops Research* **289**: 108735. DOI: doi.org/10.1016/j.fcr.2022.108735
- Liu S, Yuan TZ, Wang X, Reimer M, Isaak C, Ai Y. 2019. Behaviors of starches evaluated at high heating temperatures using a new model of Rapid Visco Analyzer – RVA 4800. *Food Hydrocolloids* **94**: 217–228.
- Liu Y, Jia Z, Li M, Bian K, Guan E, Huang W. 2024. Effect of heat-moisture treatment of wheat (*Triticum aestivum* L.) grain on micronutrient content of flour, and noodles and bread qualities. *Journal of Cereal Science* **115**: 103836. DOI: 10.1016/j.jcs.2023.103836
- Mastrangelo AM, Cattivelli L. 2021. What Makes Bread and Durum Wheat Different?. *Trends in plant science* **26**: 677–684.
- Nikolić NČ, Krsić MS, Šimurina O, Cakić S, Mitrović J, Pešić M, Karabegović I. 2023. Regression analysis in examination the rheology properties of dough from wheat and *Boletus edulis* flour. *Journal of Food Composition and Analysis* **115**: 105022. DOI: 10.1016/j.jfca.2022.105022

- Nurani LH, Rohman A, Windarsih A, Guntarti A, Riswanto FDO, Lukitaningsih E, Fadzillah NA, Rafi M. 2021. Metabolite Fingerprinting Using ¹H-NMR Spectroscopy and Chemometrics for Classification of Three Curcuma Species from Different Origins. *Molecules* **26**. DOI: 10.3390/molecules26247626
- Oddy, J., Raffan, S., Wilkinson, M. D., Elmore, J. S., & Halford, N. G. (2022). Understanding the Relationships between Free Asparagine in Grain and Other Traits to Breed Low-Asparagine Wheat. *Plants*, **11**. DOI: 10.3390/plants11050669
- Pastor K, Kojić J, Nastić N, Dobrijević D, Horvat M, Horvat Z, Ačanski M. 2022. Authentication Methodologies of Artisan and Sourdough Breads: State-of-the-Art and Perspectives 680–686.
- Pehlivan Karakas F, Keskin CN, Agil F, Zencirci N. 2021. Profiles of vitamin B and E in wheat grass and grain of einkorn (*Triticum monococcum* spp. *monococcum*), emmer (*Triticum dicoccum* ssp. *dicoccum* Schrank.), durum (*Triticum durum* Desf.), and bread wheat (*Triticum aestivum* L.) cultivars by LC-ESI-MS/MS analysis. *Journal of Cereal Science* **98**: 103177.
- Petrenko V, Liubich V, Bondar V. 2017. Baking quality of wheat grain as influenced by agriculture systems, weather and storing conditions. *Romanian Agricultural Research* **34**.
- Piergiovanni A, Rizzi R, Pannacciulli E, Gatta C. 2009. Mineral composition in hulled wheat grains: A comparison between emmer (*Triticum dicoccon* Schrank) and spelt (*T. spelta* L.) accessions. *International Journal of Food Sciences and Nutrition* **48**. DOI: 10.3109/09637489709028586
- Poudel R, Bhinderwala F, Morton M, Powers R, Rose D. 2021. Metabolic profiling of historical and modern wheat cultivars using proton nuclear magnetic resonance spectroscopy. *Scientific Reports* **11**. DOI: 10.1038/s41598-021-82616-3
- Příhoda J, Humpolíková P, Novotná D. 2003. *Základy pekárenské technologie*. Pekař a cukrář s.r.o., Praha
- Righetti L, Rubert J, Galaverna G, Folloni S, Ranieri R, Stranska-Zachariasova M, Hajslova J, Dall'Asta C. 2016. Characterization and Discrimination of Ancient Grains: A Metabolomics Approach. *International Journal of Molecular Sciences* **17**:1217. DOI: 10.3390/ijms17081217
- Rizzello C, Nionelli L, Coda R, de Angelis M, Gobbetti M. 2010. Effect of sourdough fermentation on stabilisation, and chemical and nutritional characteristics of wheat germ. *Food Chemistry* **119**: 1079–1089.

- Rosell CM. 2011. Chapter 1 - The Science of Doughs and Bread Quality. In V. R. Preedy, R. R. Watson, & V. B. Patel (Eds.), *Flour and Breads and their Fortification in Health and Disease Prevention* (pp. 3–14). Academic Press. DOI: 10.1016/B978-0-12-380886-8.10001-7
- Rude RK, Singer FR, Gruber HE. 2009. Skeletal and Hormonal Effects of Magnesium Deficiency. *Journal of the American College of Nutrition* **28**: 131–141.
- Șerban LR, Păucean A, Chiș MS, Pop CR, Man SM, Pușcaș A, Ranga F, Socaci SA, Alexa E, Berbecea A, Semeniuc CA, Mureșan V. 2023. Metabolic Profile of Einkorn, Spelt, Emmer Ancient Wheat Species Sourdough Fermented with Strain of *Lactiplantibacillus plantarum* ATCC 8014. *Foods*, 12 DOI: 10.3390/foods12051096
- Shen Y, Yuan Q, Shi M, Luo B. 2024. Higher insoluble fiber intake is associated with a lower risk of prostate cancer: results from the PLCO cohort. *BMC Public Health* **24**: 234.
- Shevkani K, Katyal M, Singh N. 2024. A comparative review of protein and starch characteristics and end-use quality of soft and hard wheat. *Food Chemistry Advances* **4**: 100613. DOI: 10.1016/j.focha.2024.100613
- Shewry PR, Hawkesford MJ, Piironen V, Lampi AM, Gebruers K, Boros D, Andersson AM, Åman P, Rakszegi M, Bedo Z, Ward JL. 2013. Natural Variation in Grain Composition of Wheat and Related Cereals. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* **61**: 8295–8303.
- Shi S, Wen J, Geng H, Zhan X, Liu Y. 2024. Physicochemical properties, structural properties and gels 3D printing properties of wheat starch. *International Journal of Biological Macromolecules* **261**: 129885. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2024.129885
- Sinkovič L, Pipan B, Neji M, Rakszegi M, Meglič V. 2023. Influence of Hulling, Cleaning and Brushing/Polishing of (Pseudo)Cereal Grains on Compositional Characteristics. *Foods* **12**. DOI: 10.3390/foods12132452
- Sobczyk A, Pycia K, Stankowski S, Jaworska G, Kuźniar P. 2017. Evaluation of the rheological properties of dough and quality of bread made with the flour obtained from old cultivars and modern breeding lines of spelt (*Triticum aestivum* ssp. *spelta*). *Journal of Cereal Science* **77**: 35–41.
- Sobczyk A, Pycia K, Stankowski S, Jaworska G, Kuźniar P. 2017. Evaluation of the rheological properties of dough and quality of bread made with the flour obtained from old cultivars and modern breeding lines of spelt (*Triticum aestivum* ssp. *spelta*). *Journal of Cereal Science* **77**: 35–41.

- Státní zemědělská a potravinářská inspekce. Brno. Available from <https://www.szpi.gov.cz/> (accessed March 2024)
- Sugár E, Fodor N, Sándor R, Bónis P, Vida G, Árendás T. 2019. Spelt wheat: An alternative for sustainable plant production at low N-levels. *Sustainability (Switzerland)* **11**. DOI: 10.3390/su11236726
- Suchowilska E, Wiwart M, Borejszo Z, Packa D, Kandler W, Krska R. 2009. Discriminant analysis of selected yield components and fatty acid composition of chosen *Triticum monococcum*, *Triticum dicoccum* and *Triticum spelta* accessions. *Journal of Cereal Science* **49**: 310–315.
- Sun Y, Ji X, Yao Y, Li H. 2023. Effect of low temperature microwave treatment on lipid stability and antioxidant capacity of whole wheat flour. *LWT* **182**: 114854. DOI: 10.1016/j.lwt.2023.114854
- Szuba-Trznadel A, Gałka B, Kamińska J, Jama-Rodzeńska A, Król Z, Jarki D, Fuchs B. 2024. Diversity of chemical composition and nutritional value in grain from selected winter wheat cultivars grown in south-western Poland. *Scientific Reports* **14**: 2630. DOI: 10.1038/s41598-024-53094-0
- Takač V, Tóth V, Rakszegi M, Mikó P, Mikić S, Mirosavljević M. 2022. The Influence of Farming Systems, Genotype and Their Interaction on Bioactive Compound, Protein and Starch Content of Bread and Spelt Wheat. *Foods* **11**. DOI: 10.3390/foods11244028
- Tamba-Berehoiu RM, Lambrache N, Popa C. 2019. Assessment of Gluten Index Component Wet Gluten Remaining on the Sieve as Predictor of Wheat Bakery Potential. *Revista de Chimie -Bucharest- Original Edition-* **70**: 3994. DOI: 10.37358/RC.19.11.7690
- Thanhaeuser SM, Wieser H, Koehler P. 2014. Correlation of Quality Parameters with the Baking Performance of Wheat Flours. *Cereal Chemistry* **91**: 333–341.
- Tóth V, Láng L, Vida G, Mikó P, Rakszegi M. 2022. Characterization of the Protein and Carbohydrate Related Quality Traits of a Large Set of Spelt Wheat Genotypes. *Foods* **11**. DOI: 10.3390/foods11142061
- Tsagkaris A, Kalogiouri N, Hrbek V, Hajslova J. 2022. Spelt authenticity assessment using a rapid and simple Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) method combined to advanced chemometrics. *European Food Research and Technology* **249**: 1–10.

- ÚKZUZ. 2023. Seznam doporučených odrůd. Listovky 2023. Brno. Available from <https://eagri.cz/public/portal/ukzuz/odrudy/seznam-doporucenych-odrud/x2023/listovky> (accessed February 2024)
- Ústav zdravotních informací a statistiky ČR. 2023. Celiak. Společnost pro bezpečnou dietu, Praha. Available from <https://celiak.cz/2023/05/19/pocty-celiaku-v-ceske-republice-v-roce-2022/> (accessed May 2023)
- Warechowska M, Anders A, Warechowski J, Bramowicz M, Markowska-Mendik A, Rejmer W, Tyburski J, Kulesza, S. 2023. The endosperm microstructure, physical, thermal properties and specific milling energy of spelt (*Triticum aestivum* ssp. *spelta*) grain and flour. *Scientific Reports* **13**: 3629. DOI: 10.1038/s41598-023-30285-9
- Wieser H. 2000. Comparative investigations of gluten proteins from different wheat species. *European Food Research and Technology* **211**: 262–268.
- Wieser H. 2007. Chemistry of gluten proteins. *Food Microbiology* **24**: 115–119.
- Wieser H, Kieffer R. 2001. Correlations of the Amount of Gluten Protein Types to the Technological Properties of Wheat Flours Determined on a Micro-scale. *Journal of Cereal Science* **34**: 19–27.
- Wieser H, Antes S, Seilmeier W. 1998. Quantitative Determination of Gluten Protein Types in Wheat Flour by Reversed-Phase High-Performance Liquid Chromatography. *Cereal Chemistry* **75**: 644–650.
- Wieser H, Hsam SLK, Zeller FJ. 2003. Relationship Between the Qualitative and Quantitative Compositions of Gluten Protein Types and Technological Properties of Synthetic Hexaploid Wheat Derived from *Triticum durum* and *Aegilops tauschii*. *Cereal Chemistry* **80**: 247–251.
- Winterová R, Holasová M, Fiedlerová V. 2016. Effect of spelt pearling on the contents of total dietary fibre, wet gluten, protein and starch fractions. *Czech Journal of Food Sciences* **34**: 61–67.
- Xue C, auf'm Erley GS, Rossmann A, Schuster R, Koehler P, Mühling KH. 2016. Split Nitrogen Application Improves Wheat Baking Quality by Influencing Protein Composition Rather Than Concentration. *Frontiers in Plant Science* **7**. DOI: 10.3389/fpls.2016.00738

- Yazar G, Kokini JL, Smith B. 2022. Effect of endogenous wheat gluten lipids on the non-linear rheological properties of the gluten network. *Food Chemistry* **367**: 130729. DOI: doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130729
- Yuan TZ, Liu S, Reimer M, Isaak C, Ai Y. 2021. Evaluation of pasting and gelling properties of commercial flours under high heating temperatures using Rapid Visco Analyzer 4800. *Food Chemistry* **344**: 128616. DOI: [10.1016/j.foodchem.2020.128616](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.128616)
- Żuk-Gołaszewska K, Majewska K, Tyburski J, Gołaszewski J. 2018. Physical and technological properties of kernels and flour made from spelt grown in an organic farming system in north-eastern Poland. *Journal of Cereal Science* **79**: 501–507.

9 Seznam použitých zkratek a symbolů

^1H NMR	Protonová nukleární magnetická rezonance
A	Kvalitní jakostní skupina potravinářské pšenice
B	Chlebová jakostní skupina potravinářské pšenice
C	Jakostní skupina nevhodná pro pekařské využití
ČOI	Český obchodní inspektorát
$\text{D}_2\text{O}-\text{CD}_3\text{OD}$	Oxid deuteria a metanol- <i>d</i> 4
E	Elitní jakostní skupina potravinářské pšenice
ENG	Anglická verze
Ep	Ekologický způsob pěstování
FDR	Míra falešného objevu
FID	free induction decay (tlumená oscilace)
GI	Gluten index
GLI	Gliadiny
GLU	Gluteniny
GMP	Makropolymer gluteninu
H_2SO_4	Kyselina sírová
H_3BO_3	Kyselina boritá
HTS	Hmotnost tisíce semen
IRMS	Izotopová poměrová hmotnostní spektrometrie
K_2SO_4	Síran draselný
KHCO_3	Hydrogenuhličitan draselný
Kp	Konvenční způsob pěstování
L	Tažnost těsta
NaCl	Chlorid sodný
NaOH	Hydroxid sodný
NIR	Blízká infračervená spektroskopie
N-látky	Dusíkaté látky
NMR	Nukleární magnetická rezonance
P	Elasticita těsta
PC1	První hlavní komponenta PCA
PC2	Drahá hlavní komponenta PCA
PC3	Třetí hlavní komponenta PCA
PCA	Analýza hlavních komponent
RS	Ramanova spektroskopie
RVA	Rapid Visco Analyzer
SZPI	Státní zemědělská a potravinářská inspekce
TSP	Sodná sůl kyseliny 3-(Trimethylsilyl)propionové-2,2,3,3-d4
ÚKZUZ	Ústřední kontrolní a zkušební ústav zemědělský
W	Síla těsta

10 Seznam tabulek

Tabulka 1 Porovnání aminokyselin u pšenice seté a špaldy (Prugar et al. 2008).....	12
Tabulka 2 Počty případů onemocnění celiakií v ČR (ÚZIS 2023).....	13
Tabulka 3 Průměrné obsahy vitaminů na 100 g sušiny (Prugar et al. 2008).....	14
Tabulka 4 Průměrné obsahy vitaminů na 100 g sušiny (Prugar et al. 2008).....	14
Tabulka 5 Porovnání obsahů proteinů a lipidů (%) v pšenici špaldě a seté (Gebruers et al. 2008)	18
Tabulka 6 Průměrné obsahy minerálních látek (mg/kg) u pšenice seté a špaldy (Piergiovanni et al. 2009).....	19
Tabulka 7 Porovnání kvalitativních parametrů u pšenice seté a špaldy (Capouchová 2001) ..	20
Tabulka 8 Kritéria hodnocení pšenice ve skupinách pekařské jakosti ve Státních odrůdových zkouškách ÚKZUZ	21
Tabulka 9 Rozdělení vzorků pšenice seté do jakostních skupin.....	26
Tabulka 10 Analytické hodnocení dvou způsobů pěstování jakostní skupiny A	35
Tabulka 11 Analytické hodnocení dvou způsobů pěstování jakostní skupiny B	35
Tabulka 12 Analytické hodnocení dvou způsobů pěstování jakostní skupiny C	36
Tabulka 13 Analytické hodnocení dvou způsobů pěstování jakostní skupiny E.....	36
Tabulka 14 Analytické hodnocení kernzy pěstované low input systémem	36
Tabulka 15 Analytické hodnocení špaldy pěstované ekologickým způsobem	37
Tabulka 16 Analytické hodnocení konvenčně pěstovaných vzorků na NIR.....	37
Tabulka 17 Analytické hodnocení ekologicky pěstovaných vzorků na NIR	38
Tabulka 18 Seznam všech anotovaných sloučenin a jejich hodnota chemického posunu	52
Tabulka 19 Rozdíly v metabolitech získané z ¹ H NMR.....	55

11 Seznam obrázků

Obrázek 1 Struktura pšeničné obilky (Arendt & Zannini 2013)	10
Obrázek 2 Strukturní vzorce amylosy a amylopektinu.....	11
Obrázek 3 Strukturní vzorec linolové kyseliny	13
Obrázek 4 Strukturní vzorec olejové kyseliny	13
Obrázek 5 Evoluce špaldy (Chantret et al. 2005)	16
Obrázek 6 Rotující pohyb jádra vytvářející magnetický moment μ (Hemminga 1992).....	24
Obrázek 7 Převod free induction decay na spektrum (Hemminga 1992).....	25
Obrázek 8 NMR spektrum vzorku bílé mouky (Baker et al. 2006).....	25
Obrázek 9 Rozdíly mezi jakostními skupinami v analytických výsledcích	40
Obrázek 10 Bodový diagram a Loading plot (PCA analýza)	41
Obrázek 11 Korelační analýza zohledňující způsob pěstování a druh	42
Obrázek 12 PCA hlavních komponent pro <i>Triticum aestivum</i>	43
Obrázek 13 Korelační analýzy způsobů pěstování <i>Triticum aestivum</i>	43
Obrázek 14 Bodový diagram způsobů pěstování <i>Triticum aestivum</i>	44
Obrázek 15 Bodový diagram jakostních skupiny vzorků <i>Triticum aestivum</i>	45
Obrázek 16 Výsledky RVA konvenčně pěstovaných vzorků jakostní skupiny A, kp 107 (Asory), kp 122 (Bohemia), kp 101 (Fakir), kp 108 (Illusion)	45
Obrázek 17 Výsledky RVA konvenčně pěstovaných vzorků jakostní skupiny C, kp 131 (Kalbex), kp 106 (LG Mocca), kp 128 3 (Mercedes), kp 104 (RGT Sacramento)	46
Obrázek 18 Výsledky RVA konvenčně pěstovaných vzorků jakostní skupiny B, kp 113 (Campesino), kp 115 (Nonstop), kp 125 (Steffi), kp 110 1 (KWS Donovan)	46
Obrázek 19 Výsledky RVA konvenčně pěstovaných vzorků jakostní skupiny E, kp 105 (Butterfly), kp 102 (Genius), kp 124 (Julie), kp 126 (Pirueta).....	47
Obrázek 20 Výsledky RVA ekologicky pěstovaných vzorků jakostní skupiny A, ep 7 (Asory), ep 22 (Bohemia), ep 1 4 (Fakir), ep 8 (Illusion).....	47
Obrázek 21 Výsledky RVA ekologicky pěstovaných vzorků jakostní skupiny C, ep 31 (Kalbex), ep 6 (LG Mocca), ep 28 (Mercedes). ep 4 (RGT Sacramento).....	48
Obrázek 22 Výsledky RVA ekologicky pěstovaných vzorků jakostní skupiny E, ep 5 (Butterfly), ep 2 9 (Genius), ep 26 (Pirueta), ep 24 (Julie)	48
Obrázek 23 Výsledky RVA ekologicky pěstovaných vzorků jakostní skupiny B, ep 13 (Campesino), ep 10 (KWS Donovan), ep 15.1 (Nonstop), ep 25 (Steffi)	49

Obrázek 24 Spektrum odrůdy Asory (konvenční způsob pěstování), 1 acetát, 2 adenosin, 3 alanin, 4 asparagin, 5 betain, 6 cholin, 7 formát, 8 fumarát, 9 glukosa, 10 glutamát, 11 isoleucin, 12 laktát, 13 leucin, 14 lysin, 15 maltosa, 16 methionin, 17 fenylalanin, 18 rafinosa, 19 sukcinát, 20 sacharosa, 21threonin, 22 tryptofan, 23 valin	50
Obrázek 25 Spektrum odrůdy Asory (ekologický způsob pěstování), 1 acetát, 2 adenosin, 3 alanin, 4 asparagin, 5 betain, 6 cholin, 7 formát, 8 fumarát, 9 glukosa, 10 glutamát, 11 isoleucin, 12 laktát, 13 leucin, 14 lysin, 15 maltosa, 16 methionin, 17 fenylalanin, 18 rafinosa, 19 sukcinát, 20 sacharosa, 21threonin, 22 tryptofan, 23 valin	50
Obrázek 26 Spektrum odrůdy Kernza 703 (ekologický způsob pěstování), 1 acetát, 2 adenosin, 3 alanin, 4 asparagin, 5 betain, 6 cholin, 7 formát, 8 fumarát, 9 glukosa, 10 glutamát, 11 isoleucin, 12 laktát, 13 leucin, 14 lysin, 15 maltosa, 16 methionin, 17 fenylalanin, 18 rafinosa, 19 sukcinát, 20 sacharosa, 21threonin, 22 tryptofan, 23 valin	51
Obrázek 27 Spektrum odrůdy Serpentin (ekologický způsob pěstování), 1 acetát, 2 adenosin, 3 alanin, 4 asparagin, 5 betain, 6 cholin, 7 formát, 8 fumarát, 9 glukosa, 10 glutamát, 11 isoleucin, 12 laktát, 13 leucin, 14 lysin, 15 maltosa, 16 methionin, 17 fenylalanin, 18 rafinosa, 19 sukcinát, 20 sacharosa, 21threonin, 22 tryptofan, 23 valin	51
Obrázek 28 Bodový diagram a Loading plot získané z ¹ H NMR výsledků	53
Obrázek 29 Statisticky významné metabolity	54
Obrázek 30 Rozdíly mezi vzorky v koncentracích statisticky významných metabolitů	56
Obrázek 31 Rozdíly mezi vzorky v koncentracích statisticky významných metabolitů	57