



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ

FACULTY OF CHEMISTRY

ÚSTAV CHEMIE POTRAVIN A BIOTECHNOLOGIÍ

INSTITUTE OF FOOD SCIENCE AND BIOTECHNOLOGY

**AROMATICKY AKTIVNÍ LÁTKY VYBRANÝCH DRUHŮ
BYLIN**

AROMA ACTIVE COMPOUNDS OF SELECTED TYPES OF HERBS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Pavla Škutová

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. Eva Vítová, Ph.D.

BRNO 2018

Zadání diplomové práce

Číslo práce: FCH-DIP1226/2017
Ústav: Ústav chemie potravin a biotechnologií
Studentka: **Bc. Pavla Škutová**
Studijní program: Chemie a technologie potravin
Studijní obor: Potravinářská chemie a biotechnologie
Vedoucí práce: **Ing. Eva Vítová, Ph.D.**
Akademický rok: 2017/18

Název diplomové práce:

Aromaticky aktivní látky vybraných druhů bylin

Zadání diplomové práce:

- Zpracujte literární přehled dané problematiky:
 - vybrané druhy léčivých rostlin – charakteristika, složení, vlastnosti
 - možnosti stanovení aromaticky aktivních látek v léčivých rostlinách – přehled aplikací
- Pomocí metody SPME–GC–MS identifikujte aromaticky aktivní látky ve vybraných typech léčivých rostlin
- Porovnejte a diskutujte složení aromatických látek jednotlivých vzorků

Termín odevzdání diplomové práce: 7.5.2018

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

Bc. Pavla Škutová
student(ka)

Ing. Eva Vítová, Ph.D.
vedoucí práce

prof. RNDr. Ivana Márová, CSc.
vedoucí ústavu

V Brně dne 31.1.2018

prof. Ing. Martin Weiter, Ph.D.
děkan

ABSTRAKT

Diplomová práce se zabývá identifikací aromaticky aktivní látek v léčivých bylinách. Soubor tvoří 5 druhů bylin: meduňka lékařská (*Melissa officinalis*), měsíček lékařský (*Calendula officinalis*), šalvěj muškátová (*Salvia sclarea*), ostropestřec mariánský (*Silybum marianum*), jestřabina lékařská (*Galega officinalis*). Tyto rostliny jsou známé pro své pozitivní účinky v lidovém léčitelství. K charakterizaci jejich vonných látek byla zvolena metoda SPME-GC-MS. Během identifikace těkavých látek byl kladen důraz na potenciálně alergenní složky vyjmenované v Nařízení ES 1223/2009 v příloze III.

Celkem bylo v meduňce identifikováno 106 látek včetně 8 alergenů, měsíček obsahoval 104 sloučenin z toho 7 alergenů, v šalvěji bylo nalezeno 82 sloučenin zahrnujících 5 alergenů, v ostropestřci se nacházelo 73 látek včetně 6 alergenů, v jestřabině bylo popsáno 110 sloučenin a z toho 9 alergenů.

KLÍČOVÁ SLOVA

léčivé byliny, aromaticky aktivní látky, SPME, GC-MS, meduňka lékařská, měsíček lékařský, šalvěj muškátová, ostropestřec mariánský, jestřabina lékařská

ABSTRACT

This diploma thesis deals with the identification of aroma active compounds in medicinal herbs. The group consists of 5 types of herbs: lemon balm (*Melissa officinalis*), pot marigold (*Calendula officinalis*), clary sage (*Salvia sclarea*), milk thistle (*Silybum marianum*), goat's rue (*Galega officinalis*). These plants are known for their positive effects in folk medicine. The SPME-GC-MS method was chosen to characterize the fragrances. During the identification of volatile compounds, emphasis was put on suspected fragrance allergens listed in EC Regulation 1223/2009 in Annex III.

Overall 106 compounds were identified together with 8 allergens in lemon balm, pot marigold contained 104 compounds with 7 allergens included, 82 compounds including 5 allergens in clary sage, 73 compounds were identified in milk thistle including 6 allergens and 110 compounds with 9 allergens included in goat's rue.

KEYWORDS

herbs, aroma active compounds, SPME, GC-MS, lemon balm, pot marigold, clary sage, milk thistle, goat's rue

ŠKUTOVÁ, P. *Aromaticky aktivní látky vybraných druhů bylin*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta Chemická, 2018. 91 s. Vedoucí diplomové práce Ing. Eva Vítová, Ph.D.

PROHLÁŠENÍ

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

.....
podpis studenta

Poděkování

Na tomto místě bych ráda poděkovala své vedoucí diplomové práce Ing. Evě Vítové, Ph.D. za věnovaný čas, ochotu, odborné vedení a cenné rady při sepisování práce. Děkuji Bc. Elišce Motúzové za její pomoc při praktické části práce v laboratoři.

Obsah

Abstrakt	3
Abstract	4
1 Úvod	8
2 Teoretická část	9
2.1 Vybrané druhy bylin	9
2.1.1 Meduňka lékařská (<i>Melissa officinalis</i>)	9
2.1.2 Měsíček lékařský (<i>Calendula officinalis</i>).....	13
2.1.3 Šalvěj muškátová (<i>Salvia sclarea</i>)	17
2.1.4 Ostropestřec mariánský (<i>Silybum marianum</i>).....	22
2.1.5 Jestřabina lékařská (<i>Galega officinalis</i>).....	26
2.2 Potenciálně alergenní aromatické látky.....	28
2.2.1 Charakterizace vybraných vonných alergenů.....	32
2.3 Možnosti stanovení AAL	36
2.3.1 Metoda SPME-GC-MS	37
3 Experimentální část	39
3.1 Analyzované vzorky	39
3.2 Laboratorní vybavení.....	40
3.2.1 Technické vybavení	40
3.2.2 Ostatní pomůcky	40
3.3 Podmínky analýzy pomocí SPME-GC-MS.....	40
3.3.1 SPME extrakce	40
3.3.2 GC-MS analýza.....	40
3.4 Vyhodnocení výsledků SPME-GC-MS analýzy	41
3.5 Zpracování výsledků.....	41
4 Výsledky a diskuze	42
4.1 Meduňka lékařská.....	45
4.2 Měsíček lékařský	51
4.3 Šalvěj muškátová.....	58
4.4 Ostropestřec mariánský.....	63
4.5 Jestřabina lékařská	67
5 Závěr	73

6	Seznam použitých zdrojů.....	74
7	Seznam použitých zkratek.....	85
8	Seznam příloh	86
9	Přílohy	87

1 ÚVOD

Od nepaměti sloužily byliny jako levný zdroj přírodních léčiv. Lidové léčitelství využívalo tyto rostliny proti různým nemocem na základě zkušeností s jejich léčivými účinky. Znalost správného zpracování a výroby mastí, tinktur, čajů aj. se předávala z generace na generaci. Po dlouhou dobu lidé nevěděli, že za těmito účinky stojí chemické sloučeniny – aktivní látky obsažené v těchto bylinách.

Díky dnešní vyspělosti analytické chemie jsme schopni odpovědné složky identifikovat a izolovat z kompletního spektra látek rostliny. Otevřela se tak nová možnost zkoumání jejich chemické podstaty a účinků na člověka. Významnou skupinou jsou vonné, tj. aromaticky aktivní látky (AAL). Ty dávají rostlině nejen typickou vůni, ale mohou sloužit i jako jejich přirozená obrana proti vnějším vlivům, ovlivňovat okolní organismy ať už pozitivním či negativním způsobem.

Vůně jsou neodmyslitelnou součástí našeho každodenního vnímání světa kolem sebe. Mohou ovlivnit naše mnohá rozhodnutí, náladu či chuť poznat něco nového. Tohoto poznatku hojně využívá potravinářský i kosmetický průmysl, kdy pomocí přidávání aromat do rozličných výrobků stimuluje naše smysly. Takto přidávané vonné látky mohou různě působit na naše tělo. Byly již zaznamenány nepříznivé účinky včetně alergických reakcí při požití či použití výrobku obsahujícího AAL.

V této práci je popsáno 5 vybraných druhů bylin v lidovém léčitelství známých pro své příznivé účinky – meduňka lékařská (*Melissa officinalis*), měsíček lékařský (*Calendula officinalis*), šalvěj muškátová (*Salvia sclarea*), ostropestřec mariánský (*Silybum marianum*), jestřabina lékařská (*Galega officinalis*). V praktické části byla provedena charakterizace AAL v těchto rostlinách pomocí techniky SPME-GC-MS s důrazem na identifikaci potenciálně alergenních vonných složek.

2 TEORETICKÁ ČÁST

V následující části je zpracováno teoretické pozadí této diplomové práce. První část je zaměřena na charakteristiku 5 vybraných bylin. Druhá podkapitola uvádí do problematiky potencionálně alergenních aromatických látek. Celou tuto kapitolu uzavírá stručný přehled možností stanovení vonných látek společně s uvedením použité metody.

2.1 Vybrané druhy bylin

2.1.1 Meduňka lékařská (*Melissa officinalis*)

- Říše: Rostliny (*Plantae*)
- Podříše: Cévnaté rostliny (*Tracheobionta*)
- Oddělení: Krytosemenné (*Magnoliophyta*)
- Třída: Vyšší dvouděložné (*Rosopsida*)
- Řád: Hluchavkotvaré (*Lamiales*)
- Čeleď: Hluchavkovité (*Lamiaceae*)
- Rod: Meduňka (*Melissa*)
- Druh: Meduňka lékařská (*Melissa officinalis*)

V 17. století řád katolických mnichů karmelitánů vyráběl ze směsi meduňky a dalšího koření tzv. „Karmelskou vodu“, která se úspěšně používá až dodnes při zvýšeném nervovém napětí, ochablosti a mdlobách [1].

Meduňka lékařská (viz Obr. 1) je vytrvalá až 80 cm vysoká bylina. Vstřícné, dlouhé řapíkaté listy eliptického tvaru s vroubkovaně pilovitým okrajem čepele přisedají na žláznatě chlupatou, čtyřhrannou lodyhu. Kvete počátkem léta. Květy jsou bledé se starorůžovým až namodralým nádechem. Dvoupyský kalich s bělavou korunou roste v květenství jednostranného lichopřeslenu. Plodem jsou tvrdky. Bylina má svůj původ ve Středozeří. Pro svou příjemnou vůni po citronech, je oblíbenou součástí bylinkových zahrádek [1-3].



Obr. 1 Meduňka lékařská (*Melissa officinalis*) [4]

2.1.1.1 Chemické složení

V meduňce lékařské byly identifikovány následující složky: deriváty kyseliny hydroxycinnamové, zvláště kyselina rozmarýnová, kávové kyseliny, kyselina chlorogenová a taniny [5]. Další významné složky jsou flavonoidy, včetně katechinu 7-O-beta-D-glukopyranosid, apigeninu 7-O-beta-D-glukopyranosid a luteolinu 3'-O-beta-D-glukuronopyranosid, monoterpénové glykosidy, eugenylglykosid, seskviterpeny včetně β -karyofylenových a germakrenových, triterpeny [6-8]. V parních destilátech meduňky byl zjištěn dehydroabietan a další diterpenové uhlovodíky, přičemž relativní podíl těchto skupin sloučenin se během vegetačního období značně lišil [8].

2.1.1.2 Aromaticky aktivní látky meduňky

Esenciální olej (EO) se v meduňce lékařské objevuje v množství 0,02 až 0,3 %, což je v poměru s ostatními rostlinami taxonu *Lamiaceae* poměrně malý obsah. Tvorba EO a jeho složení je silně ovlivněna ekologickými podmínkami a genetikou byliny [9]. V předchozích analýzách byly identifikovány jako hlavní složky geranial, neral, citronellal, (E)-karyofylen, karyofylen oxid, geraniol, thymol, β -pinen, α -pinen, karvakol, linalool, a dekadienal [9,10,11,12]. Ze studií vyplývá, že geranial (citral A) může dosahovat až 40 % a neral (citral B) kolem 30 % celkového obsahu EO, tedy na celkový citral může připadat až 74 % [9,10,11]. Okolo 75 % citralu bylo zaznamenáno v publikacích se vzorky z Indie, Brazílie, Tadžikistánu, na Kubě se pohybovalo množství okolo 70 % a byliny z Turecka, Slovenska obsahovaly 50-56 % citralu [9].

Tab. 1 Zastoupení skupin AAL identifikovaných pomocí techniky HS-SPME v listech meduňky lékařské [12].

Složka	Zastoupení %
Alkoholy	2,0
Ketony	0,4
Monoterpeny	3,3
Oxidované monoterpeny	78,5
Seskviterpeny	14,9
Ostatní	0,9

Tab. 2 Identifikované aromatické složky meduňky lékařské. Tři časově odlišné studie z různých oblastí. Při analýzách byla použita technika plynové chromatografie s hmotnostní detekcí. Země a rok v záhlaví tabulky se vztahují k původu vzorku a jeho roku sběru.

	Tádžikistán, 2012 [10]	Indie, 2009-2011 [9]	Indie, 2011 [12]
Identifikované AAL v esenciálním oleji meduňky lékařské	1-Okten-3-ol	α -Pinen	β -Pinen
	6-Methyl-5-hepten-2-on	1-Okten-3-ol	Artemiseol
	Myrcen	6-Methyl-5-hepten-2-on	1-Okten-3-ol
	α -Felandren	α - Felandren	3-Oktanol
	p-Cymen	p-Cymen	6-Methyl-5-hepten-2-on
	Limonen	Limonen	3- δ -Karen
	γ -Terpinen	Citronellal	(Z)- β -Ocimen
	α -Tujon	(Z)-Isocitral	Linalool
	β -Tujon	(E)-Isocitral	Cis-rose-oxid
	Citronellal	Methyl chavicol	Trans-rose-oxid
	(Z)-Isocitral	Citronellol	Cis-verbenol
	(E)-Isocitral	Nerol	Limonen oxide
	Methyl chavicol	Neral	Isopulegon
	Nerol	Geraniol	Myrtenol
	Neral	Methyl citronellát	Citronellol
	Anízaldehyd	Geranial	Geraniol
	Geraniol	Geranyl formát	(Z)-Citral
	Methyl citronellát	Methyl geranát	Methyl geranát
	Geranial	Neryl acetát	Citronellyl acetát
	(E)-Anethole	n-Undekanol	α -Kopaen
	Methyl geranát	Geranyl acetát	Geranyl acetát
	Ethyl nerolát	4a- α ,7- β ,7a- α -Nepetalakton	β -Karyofylen
	Geranyl acetát	(E)- Karyofylen	α -Bergamoten
	(E)- Karyofylen	α -Humulen	α -Humulen
	α -Humulen	Germakren D	Germakren D
	Germakren D	(Z)-Nerolidol	α -Farnesen
	(E,E)- α -Farnesen	(E)-Nerolidol	δ -Kadinen
δ -Kadinen	Karyofylen oxid		
Karyofylen oxid	Kyselina linolová		

2.1.1.3 Vlastnosti a účinky

Pro silici meduňky jsou typické terpenové aldehydy: citral, citronelal; z hydroxykyselin se zde objevuje kyselina rozmarýnová [13].

Meduňka je známá hlavně pro své sedativní účinky. Používá se při nespavosti, vyčerpanosti, bolestech hlavy, celkově totiž uklidňuje nervový systém. Je jí připisován i pozitivní efekt na žaludeční poruchy, revmatismus či hypertenzi. Celkově lze říci, že meduňka má sedativní, antioxidační, spasmolytické, antibakteriální a protizánětlivé vlastnosti [1,2,3,8]. V některých kulturách je meduňce připisován i afrodiziakální účinek [14]. Směs aktivních látek byliny podporuje aktivitu transaminázy kyseliny γ -aminomáselné (GABA) a tak se zvyšuje její dostupnost pro mozek [8]. V současné době se používá k úlevě od bolestí hlavy vyvolaných stresem a jako antivirotikum pro zlepšení hojení oparů herpes simplex. Některé práce naznačily, že by meduňka mohla zlepšovat kognitivní funkce a pomoci při terapii u pacientů s Alzheimerovou chorobou [10]. Sedativní účinek byl potvrzen při aplikaci alkoholového extraktu. Byla pozorována sedace závislá na podané dávce, indukce spánku a byl posílen hypnotický efekt pentobarbitalu [15]. V EO se nacházejí monoterpeny a seskviterpeny, které působí na protozoa. Tyto látky se projevily jako toxické při testech s krevními vzorky s *Trypanosoma major* [7]. Cílem *in vitro* studie bylo zjistit celkový obsah antioxidačních látek v meduňce. Zjištěná konečná hodnota se pohybovala v koncentracích větších než 75 mmol/100 g. Během proběhlé studie s potkany se prokázal cytoprotektivní účinek extraktu z byliny. Tento efekt byl zčásti způsoben právě obsaženými antioxidanty a jejich vychytáváním volných radikálů [5].

V minulosti byla meduňka považována za neškodné přírodní léčivo, které se může užívat bez omezení [3]. V dnešní době se objevuje mnoho posudků dokazujících opak. Kyselina rozmarýnová obsažená v bylině dokáže inhibovat klasickou i alternativní cestu konvertázy. Studie antitrombotických účinků extraktu ukázala, že kyselina potlačí funkci konvertázy C3 a tím zablokuje možnost imunohemolýzy. Tento efekt byl popsán i u konvertázy C5 [5]. Další práce potvrdily ovlivnění funkce štítné žlázy, kdy dochází ke znemožnění vazby thyreotropních hormonů na plasmatickou membránu a následné aktivaci orgánu [16]. Při testech akutní toxicity pokusy na myších při podávání extraktu meduňky několika skupinám jedinců byly při patologii potvrzeny nekrózy a atrofie v játrech a ledvinách [8]. Abudayyak a kol. (2014) ve své práci upozorňují na potenciální cyto- a genotoxicitu extraktů této byliny [14].

2.1.1.4 Sběr a použití

Z rostliny se využívají listy. Za nejcennější jsou považovány listy z mladých vršků rostlin, starší již nedosahují takové kvality. Listy by se měly trhat krátce před rozkvětem. Naťová droga se musí sušit rychle, tak aby si zachovala původní barvu a co nejvíce obsahových látek. Z mladších rostlin je možné sklízet i nať [1,2,3].

Meduňka má zastoupení v mnoha odvětvích kosmetiky, převážně v přípravcích pro péči o pleť. Extrakty z rostliny se uplatňují v parfumerství pro své příjemné aroma. Hojně se používá v domácnostech pro výluhy do bylinkových čajů na uklidnění. Meduňka se považuje za jedlou, proto se také objevuje v ovocných salátech či nápojích pro osvěžení. Své místo si našla i v průmyslovém potravinářství, kde se maceruje ve směsích s dalšími bylinami a kořením při výrobě likérů. Z meduňky se připravuje i meduňkový ocet [1,2,3,8,10]. Pro odbourání napětí, ochablosti se využívá již zmíněná „karmelská voda“. Ta se připravuje ze směsi meduňky a koření, obsahuje alkohol [1]. Rostlina se také používá pro výrobu mnoha fytofarmaceutických výrobků. Díky uklidňujícímu účinku našel extrakt z meduňky své místo v aromaterapii [10].

2.1.2 Měsíček lékařský (*Calendula officinalis*)

- Říše: Rostliny (*Plantae*)
- Podříše: Cévnaté rostliny (*Tracheobionta*)
- Oddělení: Krytosemenné (*Magnoliophyta*)
- Třída: Vyšší dvouděložné (*Rosopsida*)
- Řád: Hvězdnicotvaré (*Astrales*)
- Čeleď: Hvězdnicovité (*Astraceae*)
- Rod: Měsíček (*Calendula*)
- Druh: Měsíček lékařský (*Calendula officinalis*)

V dřívějších dobách se měsíčku přezdívalo „šafrán chudáků“. Tuto přezdívku si získal, protože byl často v minulosti zaměňován za vzácný šafrán [1].

Květy této rostliny obsahují karotenoidní barviva – lutein, zeaxanthin, která mu dodávají typickou temně oranžovou barvu. Složené květenství se skládá ze zeleného kalichu, vnitřních rourkovitých a jazýčkovitých obvodových květů, uspořádaných do dvou nebo tří kruhů. Plodem jsou bezchmýrné srpovitě prohnuté nažky. Měsíček patří mezi jednoleté rostliny, dorůstá až 50 cm. Rozvětvenou lodyhu s přisedlými listy vyživují vřetenovité kořeny. Letnička je původem z jižní Evropy a Blízkého východu. U nás je oblíbenou okrasnou rostlinou [1,2,3,17].



Obr. 2 Měsíček lékařský (*Calendula officinalis*) [18]

2.1.2.1 Chemické složení

Hlavními identifikovanými složkami měsíčku jsou triterpenoidy a flavonoidy [19,20]. V extraktu ze sušených květů rostliny bylo identifikováno více než osm bioaktivních monoesterů triterpendiolu. Mezi osm nejčastějších patří: faradiol-3-O-palmitát, faradiol-3-O-myristát, faradiol-3-O-laurát, arnidiol-3-O-palmitát, arnidiol-3-O-myristát, arnidiol-3-O-laurát, calenduladiol-3-O-palmitát, calenduladiol-3-O-myristát [21]. Typickými flavonoidními barvivy jsou patulitrin, patuletin [22]. Saponinové frakce izolované z květu zahrnují kyselinu oleanolovou a kyselinu ursolovou. Kyselina oleanolová se vyskytuje v množství až 205 mg na g sušiny [23]. Dále byly identifikovány kalendasaponiny A, B, C, D; iononové glukosidy officinosides A, B a seskviterpenové oliglukosidy officinosides C, D [24].

Tab. 3 Hlavní složky měsíčku lékařského [17]

Hlavní složky květu			
Olej	15,0 %	Bílkoviny	2,0 %
Triterpenové saponiny	2,0 – 10,0 %	Flavonoidy	0,62 – 1,73 %
Popel	7,2 %		

2.1.2.2 Aromaticky aktivní látky měsíčku

Rostliny z rodu *Calendula* mají své charakteristické aroma a chuť díky obsahu převážně mono- a seskvi- terpenů v jejich EO, které jsou zároveň důvodem aplikace měsíčku v tradičním léčitelství [25]. Největších výtěžků EO se dosahuje při plném rozkvětu měsíčku, naopak nejmenších při počátku tvorby květu [26]. Studie ukázaly, že se složky oleje mění nejen dle geografické polohy, způsobu získání oleje, ale například i podle salinity půdy [25]. Seskviterpeny (α -kadinen, α -cadinol, T-murrrolol, epi-bicykloseskvifelandren) a monoterpeny (limonen, 1,8-cineol, trans- β -ocimen) jsou nejvíce variabilní vzhledem ke stáří

rostliny. Dalším faktorem, který ovlivňuje složení oleje, je vegetační stádium byliny. Pro průmyslové využití je pravděpodobně optimální získat olej z rostliny při odkvétání. V této fázi obsahuje větší množství α -kadinenu, α -kadinolu, T-murrrololu, limonenu, 1,8-cineolu a P-cymen, které jsou důležité při přípravě aromat pro cukrovinky, žvýkačky, ale i kosmetiku a parfémy. Hlavním nositelem aroma je α -kadinen, proto je jeho vysoký obsah v EO pro průmyslové zpracování stěžejní [26].

Tab. 4 Identifikované složky esenciálního oleje měsíčku lékařského. Výsledky čtyř časově odlišných studií z různých oblastí. Ve všech pracích byla použita technika plynové chromatografie s hmotnostní detekcí. Země a rok v záhlaví tabulky se vztahují k původu vzorku a jeho roku sběru.

	Egypt 2008-2009 [25]	Jihoafrická republika, 2006 [26]	Brazílie, 2004 [27]	Indie, 2010 [28]
Identifikované AAL v esenciálním oleji měsíčku lékařského	α -Pinen	α -Pinen	α -Kopaen	α -Pinen
	β -Farnesen	β -Pinen	α -Ionon	Kamfen
	α -Humulen	Limonen	α -Humulen	Sabinen
	α -Patchoulen	Eukalyptol/1,8-cineol	Geranylaceton	Limonen
	Aromadendren (allo)	Trans- β -ocimen	γ -Muurolen	Eukalyptol/1,8-cineol
	γ -Gurjunen	Geraniol	β -Ionon	Trans- β -ocimen
	γ -Muurolen	α -Cubeben	Leden	Dihydroacetone
	α -Muurolen	α -Ylangen	α -Muurolen	Carvenon
	γ -Kadinen	α -Humulen	γ -Kadinen	Artemisia keton
	δ -Kadinen	Epi-bicyklo-seskvifelandren	δ -Kadinen	α -Pinen epoxid
	β -Patchouli alkohol	Kalakren	α -Kadinen	Neo-allo-ocimen
	α -Kalcoren	δ -Kadinen	α -Kalacoren	Trans-myoxid
	Muurool-5-enen-4-B-ol (cis)	Kadina 1,4-diene	Karyofylen oxid	Cis-tageton
	β -Kalakoren	α -Kadinen	Kopaen-4- α -ol	Kamphor
	Nerolidol (E)	α -Kadinol	β -Oplopenon	α -Terpinolen
	Guaiol	T-Muurolol	Viridiflorol	β - Karyofylen
	β -Akorenol		Ledol	Trans-pinokarveol
	Kadinol (epi- α)		1,10-di-epi-kubenol	Verbenon
	Muurolol (epi- α)		1-epi-cubenol	Trans-ocimenon
	α -Eudesmol		Epi- α -muurolol	Isopiperiton
	α -Patchouli alkohol		α -Kadinol	2-methyl-6-hepten-3-ol
	Bulnesol		Kadalen	Spatulenol
	α -Kadinol			
	Eudesmol (7-epi- α)			
	Isocedranol (5)			
	α -Bisabolol			
	Bisabolol (epi- α)			
	Pentokosan			

2.1.2.3 *Vlastnosti a účinky*

Nejdůležitějšími sloučeniny připravované drogy jsou v chemické podstatě saponiny, silice, karotenoidy, flavonoidy, které zastupují glykosidy kvercetinu, isorhamnetinu [13]. Měsíček lékařský se běžně z celého rodu používá jako jediný v klinické praxi. Na seznamu fytotherapie WHO je zapsán pro podporu hojení ran a protizánětlivé účinky [29].

Měsíček se uplatňuje při léčení zánětů gastrointestinálního traktu, při křečích, při podpoře funkce žlučníku, tvorby žluči. Má čisticí a detoxikační schopnosti. Topická aplikace infuze se používá jako antifungální a antiseptická látka při poranění, ekzému, popáleninách. Výluh sušeného květenství slouží jako obklad na oči – konjunktividu, opruzeniny, akné, jiné zánětlivé stavy pokožky a sliznic. V homeopatii si našla své místo i tinktura pro léčbu duševního napětí a nespavosti pro své sedativní vlastnosti [1,2,3,29,30].

V dnešní době se vědci zabývají možností využití extraktu a v boji proti rakovině. Během studie se aplikoval laserem aktivovaný extrakt, který působí na funkci lymfocytů [31]. Dále pokračuje snaha popsat princip účinku na hojení ran. Látky v extraktu nejspíše podporují růst epitelu a zesilují imunitní odpověď organismu. Pokusy na potkanech naznačují, že účinek může být zprostředkován stimulací fagocytózy, zvýšením granulace, ovlivněním metabolismu glykoproteinů, nukleoproteinů a kolagenních látek v regenerující se tkáni [17]. Extrakty jsou dále prozkoumávány pro své antioxidační vlastnosti. V rostlinách rodu *Calendula* bylo identifikováno devatenáct karotenoidů, včetně flavoxathinu, izomerů lykopenu, karotenu a rubixanthinu, které mohou přispět k potenciálním antioxidačním účinkům. Extrakt vykazuje poměrně silnou schopnost zhaset reaktivní formy kyslíku [32]. Další studie se zajímají o extrakt měsíčku lékařského pro možnost uplatnění při boji s HIV, pro antivirotické a antigenotoxické vlastnosti [29].

Vzácně se vyskytují informace o negativních účincích při používání měsíčku nebo přípravků jej obsahujících. Byla popsána senzibilace a alergické kontaktní reakce. Při kloktání infuzí došlo k několika případům anafylaktického šoku [29]. Studie akutní toxicity s potkany ukazují, že extrakt je relativně netoxický. Ojedinelí jedinci vykazovali známky podráždění kůže a očí. Obdobné výsledky mělo i klinické testování u lidí. Zatím nejsou k dispozici žádné záznamy o karcinogenitě, reprodukční nebo vývojové toxicitě [33].

2.1.2.4 *Sběr a použití*

Sbírají se květy přesněji obvodové okvětní jazýčky, případně i celý květ s kalichem. Sběr probíhá od konce srpna až do začátku září. Nejcennější jsou především květy s tmavě oranžovým zbarvením [1,2,3]. Tradičně se měsíček uplatňuje jako součást lidového léčitelství v podobě doma vyrobených mastí, macerátů, odvarů, tinktur. Díky této dlouhé tradici se prosadil v kosmetickém průmyslu ve více než 200 typech přípravků především v oblasti péče tělo, tj. krémů, pleťových vod, šamponů [29]. Pro schopnost inhibovat rozpad proteinů slin se

měsíček uplatňuje v ústních vodách pro svůj deodorační efekt [34]. Flavonoidní barviva obsažená v květech umožňují využití byliny k barvicím účelům [22]. Měsíček je možné i konzumovat, a proto jej můžeme najít jako jedlou ozdobu na talíři nebo využít místo koření. Jeho nahořklá pikantní chuť je přirovnávána chuti šafránu [1,2,3]. FDA bylinu eviduje na seznamu bezpečných přísad (GRAS) [27].

2.1.3 Šalvěj muškátová (*Salvia sclarea*)

- Říše: Rostliny (*Plantae*)
- Podříše: Cévnaté rostliny (*Tracheobionta*)
- Oddělení: Kryptosemenné (*Magnoliophyta*)
- Třída: Vyšší dvouděložné (*Rosopsida*)
- Řád: Hluchavkotvaré (*Lamiales*)
- Čeleď: Hluchavkovité (*Lamiaceae*)
- Rod: Šalvěj (*Salvia*)
- Druh: Šalvěj muškátová (*Salvia sclarea*)

Šalvěj muškátová patřila do výbavy každé věstkyně. Věřily, že bylina jim umožňuje jasnovidectví, zvyšuje intuici a otevírá mysl odpovědím na vnitřní otázky [1].

Šalvěj muškátová (viz Obr. 3) se řadí do taxonu hluchavkovitých. Dorůstá výšky okolo 1 metru, v sušších oblastech s dlouhou sluneční periodou dorůstá až 150 cm. Je citlivá na vlhko. Jedná se o dvouletou bylinu, která se na příznivých stanovištích (především v subtropích) stává až trvalkou. Lodyha je přímá, větvená s přízemní listovou růžicí, pokrytá trichomy. Listy mají vejčitý tvar, zelenou až zeleno-šedou barvu a jsou rovněž pokryté „chloupky“. Květy vyrůstají v lichospeřenu po 4 až 6 kusech. Dvoupyská koruna bývá růžová, fialová nebo bílá, dolní pysk je třílaločný, horní přilbovitě vyklenutý a z vnější strany chlupatý. Plod je hnědá a zploštělá tvrdka. Bylina pochází ze Středomoří [1,3,35,36].



Obr. 3 Šalvěj muškátová (*Salvia sclarea*) [37]

2.1.3.1 Chemické složení

V šalvěži se nachází sloučeniny ze skupin sesquiterpenů, diterpenů, triterpenů, steroidů, polyfenolů a dalších. Mezi velkou část polyfenolů byliny patří kyselina kávová a její deriváty: kyselina rozmarýnová, kyselina salvianolová, kyselina lithospermic a její estery, soli. Z flavonoidů se vyskytují cirsimaritin, salvigenin. Pro celý rod jsou typické diterpeny – kryptotanshinon, dihydrotanshinon, tanshinon; triterpeny: lupany, oleanany, ursany; seskviterpeny: germakreny, karoteny, karyofyleny [38,39]. V oleji šalvěže muškátové byla zjištěna přítomnost: omega 3 (především kyselina α -linolenová) a omega 9 mastných kyselin, lektiny, taniny, tokoferoly (α -, β -, δ -), steroly (sitostanol, stigmastenoly, avenasteroly, campestanol) [39].

Tab. 5 Výživové údaje na 100 g oleje získaného ze semen šalvěže muškátové [39].

Parametr	Rozpětí hodnot na 100 g
Energetická hodnota	891 – 895 kcal
Vlhkost	0 – 0,03 g
Tuky (výpočet)	98,97 – 99,4 g
Nasycené mastné kyseliny	9,21 – 10,17 g
Nerozpustné látky (hexan)	0,04 – 0,1 g
Popel	0 g
Sodík	< 1 mg

2.1.3.2 Aromaticky aktivní látky šalvěže

Mezi hlavní složky esenciálního oleje šalvěže muškátové patří estery moterpenů a alkoholy [40]. Výsledky většiny nalezených studií se shodují, že nejvýznamnějšími AAL jsou: linalool, α -terpineol, linalyl acetát, α -terpinyl acetát, geranyl acetát [40,41,42,43]. Jejich množství je značně variabilní (viz Tab. 6) [40]. Obsah těchto složek ovlivňují nejen vnější podmínky, ale především vegetační stádium, způsob získání esenciálního oleje a použitá část rostliny [40,41]. Téměř stejné množství diterpenu (sklareol) a seskviterpenů (β -humulen, α -kadinen, β -karyofylen, β -karyofylen oxid) obsahoval olej v průběhu celé vegetace. Šalvěj obsahuje poměrně široké spektrum látek. Ve studii Souleles a kol. bylo identifikováno pomocí techniky GC-MS více než 72 těkavých složek [43]. Nejvíce EO obsahuje bylina v plném rozkvětu (okolo 0,18 %), naopak nejméně při odkvétání a téměř kompletní zralosti semen (cca 0,07 %). Dle získaných dat lze usuzovat, že nejlepší období sběru je v plném rozkvětu rostliny s nezralými mléčně bílými semeny [41].

Tab. 6 Variabilní množství hlavních těkavých látek esenciálního oleje šalvěje muškátové [40].

Aromaticky aktivní látka	Obsah [%]
linalool	2,6 - 32,8
α -terpineol	1,5 – 47,4
linalyl acetát	8,2 – 81,1
α -terpinyl acetát	stopy – 22,1

Typickou látkou pro šalvěj muškátovou je sklareol. Tato AAL se řadí mezi diterpenové alkoholy. Koncentrovaný má podobu jantarově zbarvené pevné látky se sladkou balzamičnou vůní. Běžně se používá v parfumerii, kosmetice i k aromatizaci potravin. Sklareol je zkoumán pro své účinky na lidský organismus. Jako účinný se projevil při léčbě zánětů a infekcí [9,44]. Při testech s různými typy lidských buněčných kultur byla popsána jeho cytotoxicita, avšak JECFA označila sklareol při běžných koncentracích za bezpečný. Současné studie se zaměřují na využití této látky v boji proti rakovině. Sklareol je schopen se začlenit do fosfolipidových membrán, kde potlačuje tvorbu oxidu dusnatého a prostaglandinu E2. Stimulují apoptózu nádorových buněk [44].

Tab. 7 Identifikované složky esenciálního oleje šalvěje muškátové. Výsledky tří studií z různých oblastí. Ve všech pracích byla použita technika plynové chromatografie s hmotnostní detekcí. Země v záhlaví tabulky se vztahují k původu vzorku.

	Sardinie [36]	Srbsko [42]	Slovensko [40]
Identifikované AAL v esenciálním oleji meduňky lékařské	α -Pinen	α -Pinen	Myrcen
	α -Tujen	β -Pinen	Limonen
	Kamfen	β -Myrcen	(Z)- β -Ocimen
	β -Pinen	p-Cymen	Fenylacetaldehyd
	Sabinen	Limonen	(E)- β -Ocimen
	α -Felandren	1,8-Cineol	α -Terpinolen
	Myrcen	(Z)- β -Ocimen	Linalool
	Limonen	(E)- β -Ocimen	α -Terpineol
	1,8-Cineol	Isoterpinolen	Nerol
	(Z)- β -Ocimene	Linalool	Linalyl acetát
	γ -Terpinene	Camphor	δ -Elemen
	(E)- β -Ocimene	β -Terpineol	α -Kubeben
	p-Cymene	Borneol	Neryl acetát
	Cis-linalool oxid	α -Terpineol	α -Kopaene
	Trans-linalool oxid	γ -Terpineol	Geranyl acetát
	Linalyl acetát	Linalyl formát	(E)- β -Damascenon
	β -Karyofylen	Nerol	β -Kubeben
	Terpinen-4-ol	Linalyl acetát	β -Elemen
	α -Terpinyl acetát	Bornyl acetát	τ ,4-dimethylbenzen butanal
	γ -Terpinyl acetát	α -Terpinyl acetát	β - Karyofylen
	Linalool	Neryl acetát	α -Humulen
	α -Terpineol	α -Kopaen	β - Karyofylen
	Methyl chavicol	β -Bourbonen	Germakrene D
	Neryl acetát	β -Kubeben	Valencen
	Geranyl acetát	β -Elemen	Bicyklogermakrene
	Nerol	β -Karyofylen	δ -Kadinen
	Geraniol	α -Humulen	1,5-epoxysalvial-4(14)-en
	δ -Kadinol	Germakrene D	Spatulenol
	Methyl eugenol	Bicyklogermacren	Karyofylen oxid
	Germakrene D	δ -Kadinen	Viridiflorol
	α -Eudesmol	Spatulenol	Salvial-4(14)-en-1-on
	β -Eudesmol	Karyofylene oxid	Isospathulenol
	Sklareol oxid	α -Kadinol	
	Sklareol	β -Eudesmol	
		α -Eudesmol	
		Eudesma-4(15),7-dien-1 β -ol	
		Sklareol oxid	
		Manoyl oxid	
		13-epi-manoyl oxid	
		13-epi-manool	
		Sklareol	

2.1.3.3 Vlastnosti a účinky

Esenciálnímu oleji šalvěže muškátové je připisována řada pozitivních účinků. Mezi ně patří antibakteriální, antioxidační, antidepresivní, antimutagenní, protizánětlivé. Napomáhá snížit napětí vyvolané stresem a celkovému uvolnění mysli. Nejvýznamnější farmakologické účinky jsou dány přítomností více než 100 aktivních složek, kde se najdou látky především ze skupin mono-, di-, seskvi- terpenů [36,38,45].

Salvianolová kyselina B obsažená v šalvěži má neuroprotektivní účinek, který byl pozorován u myši s cerebrální ischemií a reperfuzí [38]. Při pokusu Any Džamić a kol. (2008) vykazoval extrahovaný olej středně vysokou účinnost proti bakteriím a slabší účinnost proti kvasinkám. Také způsobil úplnou inhibici růstu mycelia u tří patogenů pocházejících z půdy a u fyto-patogenních hub *Fusarium oxysporum*, *Alternaria solani*, *Botrytis cinerea*, *Rhizoctonia solani* [42]. Výsledky testování prokázaly, že EO rostlin rodu *Salvia* mají silnou schopnost vychytávat hydroxylové, peroxylové radikály a chránit tak DNA před jejím poškozením. Antioxidační aktivita není závislá na obsaženém množství polyfenolických látek v extraktu [45].

Kontroverzním tématem zatím zůstává účinek sklareolu na lidský organismus především jeho „estrogenní“ účinek. Existuje mnoho tvrzení, že tato složka vykazuje stejné účinky jako ženský hormon estrogen. Tato tvrzení se opírají o podobnost struktury těchto dvou látek. Námitky se opírají o skutečnost, že sklareol neobsahuje fenolovou skupinu ani benzenové jádro. Jeho obsah v šalvěži muškátové je tak nízký, že by nedokázal při běžném užívání vyvolat změny hormonální hladiny v těle [1].

Negativní účinky esenciálního oleje bylin rodu *Salvia* nejsou zatím zcela prostudovány. Potenciální toxicita se odvíjí od složení EO, které je závislé na ročním období. Olej z rostlin sklizených v zimním období obsahoval vyšší množství kafru (12,3 %), α -, β -tujonu (1,9 %) a kamfenu (4,8 %). U myši se při intraperitoneální aplikaci objevily silné křeče. U extraktu ze zimy byla zjištěná $LD_{50} = 839 \text{ mg.kg}^{-1}$, oproti tomu jarní extrakt vykazoval toxicitu menší, $LD_{50} = 1200 \text{ mg.kg}^{-1}$. Obsah látek vzorku z jarní sklizně se lišil: kafr (7,7 %), α -, β -tujon (1,3 %) a kamfen (3,1 %). Tato skutečnost poukazuje na silnou korelaci mezi složením olejů a jejich toxicitou [45].

2.1.3.4 Sběr a použití

Z rostliny se sbírá list, a to krátce před květem ideálně za suchého počasí. Mohou se sbírat i celé stonky, které se poté odstraní. Šalvěj kvete přibližně od června do srpna. Éterický olej se získává parní destilací z poupat, květů a z částečně fermentovaných (zavadnutých) listů [1,35]. V léčitelství se olej používá především zevně pro různé uvolňující masáže (bolesti břicha, menstruační bolesti, čištění ran). V aromaterapii jsou mu připisovány

antidepresivní až euforické účinky. Šalvěj se přidávala do očních kapek pro pročištění a projasnění očí. V potravinářství se uplatňuje při výrobě aromat. V 19. století se používala pro ochucování vína a piva. Dnes ji najdeme v muškátovém vínu. Esenciální olej se aplikuje do řady výrobků parfumerie a kosmetiky jako ústní vody, antiperspiranty [36,45]. Americká agentura FDA uznává šalvěj muškátovou jako bezpečnou (GRAS) při použití místo koření a k dochucování. V Izraeli se používá esenciální olej k získání omega 3 mastných kyselin, které se aplikují do potravinářských výrobků pro jejich obohacení (př. mléčná čokoláda) [39].

2.1.4 Ostropestřec mariánský (*Silybum marianum*)

- Říše: Rostliny (*Plantae*)
- Podříše: Cévnaté rostliny (*Tracheobionta*)
- Oddělení: Krytosemenné (*Magnoliophyta*)
- Třída: Vyšší dvouděložné (*Rosopsida*)
- Řád: Hvězdnicotvaré (*Astrales*)
- Čeleď: Hvězdnicovité (*Astraceae*)
- Rod: Ostropestřec (*Silybum*)
- Druh: Ostropestřec mariánský (*Silybum marianum*)

Ostropestřec (viz Obr. 5) je bylinným pomocníkem při udržování zdraví jater a žlučníku nejen u lidí, ale také u našich čtyřnohých přátel-psů [1].

Bylina je původem ze Středomoří. U nás se pěstuje především jako léčivka, v teplejších oblastech volně zplaňuje. Ostropestřec je jedno až dvouletý, statný bodlák. Dorůstá výšky i přes 1 metr, v příhodných oblastech i 150 cm. Bylina má křovitý kořen a chudě větvenou lodyhu. Lodyha je plná, zaobleně hranatá, s bílou dřevinou. Listy mohou být až 40 cm dlouhé. Jsou střídavé, tuhé, ostnaté, žilnatina se barví do světlejších odstínů zelené lemované bílými skvrnami. Květy jsou purpurově červené až fialové úbory s dlouhou bílou korunní trubkou. Vyrůstají z ostnatě zubaté báze. Obdobím květu se prochází od července do září. Nažky ostropestřce jsou smáčklé, lesklé, světle až tmavohnědé barvy s čárkovitým žiháním. Na úzkém vrcholu bývá lehce opadavý chmýr [2,47].



Obr. 4 *Ostropestřec mariánský (Silybum marianum)* [56]

2.1.4.1 Chemické složení

Extrakt ostropestřce obsahuje 4-6 % silymarinu [57]. Oproti tomu v komerčních výrobcích dosahuje hodnoty 65 až 80 % v komplexu flavonolignanů, zbytek tvoří mastné kyseliny, včetně kyseliny linolové. Silymarin je komplexní směs polyfenolových molekul včetně sedmi blízce příbuzných flavonolignanů – silybin A, silybin B, isosilybin A, isosilybin B, silychristin, sildianin. Směs doplňuje taxifolin patřící mezi flavonoidy. Silybin je ve skutečnosti částečně purifikovaná frakce silymarinu, kterou tvoří směs dvou diastereoizomerů. Izomery jsou silybin A a silybin B, ve směsi se nacházejí přibližně v poměru 1:1 [58]. Dalšími složkami jsou apigenin, β -karoteny, kyselina fumarová, narigenin, kvercetin a kampferol [59]. Z ostropestřce lze získávat olej s výtěžkem 20-30 %. Olej obsahuje přibližně 60 % kyseliny linolové a 30 % kyseliny olejové [13].

2.1.4.2 Aromaticky aktivní látky ostropestřce

Zatím nebyly zveřejněny publikace, které by se zabývaly přímo složením EO ostropestřce [60]. Mhamdi a kol. (2016) ve své studii, zabývající se biologicky aktivními látkami ostropestřce, krátce zmiňují i vonné látky byliny.

Při analýze bylo zjištěno 13 AAL. Výtěžek EO ze semen vyjádřený na sušinu byla 0,12 %. Nejvíce zastoupenými složkami byly γ -kadinen (49,8 %) a α -pinen (24,5 %). Nejméně EO obsahoval limonenu (0,5 %), β -karyofylenu (0,61 %), terpinen-4-olu (1,42 %), α -humulenu (4,7 %). Hlavní skupinu sloučenin představovaly seskviterpeny (55,4 %) doprovázené monoterpeny (33,29 %) [60].

Tab. 8 Identifikované složky esenciálního oleje ostropestřce mariánského. V práci byla použita technika GC-MS. Země a rok v záhlaví tabulky se vztahují k původu vzorku a jeho roku sběru.

Identifikované AAL v esenciálním oleji ostropestřce mariánského	Tunis, 2009 [60]
	α-Pinen
	Kamfen
	Limonen
	γ-Terpinen
	Terpinolen
	Linalool
	Terpinen-4-ol
	p-Cymen-8-ol
	α-Terpinol
	β-Karyofylen
	α-Humulen
	(E)-β-Ocimene
	Germacren D
γ-Cadinen	

2.1.4.3 Vlastnosti a účinky

Hlavními farmakologicky účinnými látkami jsou flavolignany (silymarinový komplex) a flavonoidy (taxifolin, kvercetin, kamferol). Ostropestřec se používá jako hepatoprotektivum a díky obsaženému silymarinovému komplexu pro rekonvalescence po ikteru [13].

Silymarinový komplex patří mezi účinné antioxidanty. Vychytává volné kyslíkové radikály, zabraňuje peroxidaci lipidů, brání buňky před oxidativním stresem. Silibin chrání membrány buněk a složky krve před oxidačním poškozením. Silymarin se uplatňuje při léčbě onemocnění jater charakterizovaných degenerativní nekrózou, poruchou funkce včetně chronických onemocnění. Německá komise EU schválila jeho použití k léčbě jater, hepatitidy A, cirhózy způsobené alkoholem. Antioxidační aktivita je jedním z důležitých faktorů hepatoprotekce. Silymarin chrání jaterní buňky proti toxinům u lidí i zvířat. Některé druhy hub obsahují toxiny faloidin, amanitin. Toxiny se vážou na membránu jaterních buněk, kde blokují syntézu proteinů, což má za následek poškození jater a smrt. Silymarin účinně zabraňuje oběma těmito mechanismům blokací vazebných míst pro toxiny a zvýšením regenerační kapacity buněk. Dokáže také chránit játra proti poškození při jiných terapiích,

například při použití antibiotik: tetracyklinů, D-galaktozaminů, erytromycinu. Pozitivní účinek byl popsán i u neonatálních hepatocytů. Při klinických studiích bylo zjištěno, že silibin aplikovaný intravenózně do 24 hodin od požití houby, dokáže účinně chránit játra proti poškození. Poskytuje hepatoprotekci proti otravám způsobených halothanem, thioacetamidem, acetaminofenem a chrání játra před ischemickým poškozením [61].

V posledních letech se obrací pozornost k silymarinu, silibinu kvůli boji proti rakovině. Studie popisují inhibici růstu a regresi již vzniklých nádorů. U nádorů prostaty je popsán efekt na proliferaci, apoptózu buněk. Při pokusech se zvířaty a lidskými buňkami byly popsány antikarcinogenní účinky u prostaty, prsu, cervixu, kůže při imunosupresi ultrafialovým světlem a oxidačním stresem. U nádorových buněk plic, prostaty, močového měchýře dochází k inhibici jejich růstu, prodlužování buněčného cyklu a k apoptóze. Tyto vlastnosti byly zaznamenány při pokusech *in vitro*, ale také i *in vivo* [61, 62].

Extrakt ze semen ostropestřce je všeobecně dobře snášen. Při dávkách dosahujících až 900 mg na den (u dospělých osob) neprojevuje toxicitu ani vedlejší účinky. U příjmu většího než 1500 mg/den byly popsány poruchy gastrointestinálního traktu, laxativní účinek, způsobený zvýšenou sekrecí žluče. Negativními projevy mohou být i mírné alergické reakce (puritus, kopřivka). Častějšími vedlejšími projevy mohou být nadýmání, nauzea, nepravidelná stolice, zřídka kdy doprovázené bolestmi hlavy a dermatologickými příznaky. Při pokusech se zvířaty (myši, potkani, králíci, psi) nebyla popsána ante- ani post-natální toxicita. Výsledky těchto studií ukazují na velmi nízkou akutní toxicitu silymarinu. Toxicita v těhotenství, při kojení, u dětí nebyla zatím zkoumána. Při běžném užívání nejsou popsány ani negativní interakce s léčivými [61].

2.1.4.4 Sběr a použití

Ostropestřec je znám především jako léčivá bylina. Vlastní droga se získává z plodů. Z nažky se před úplnou zralostí odstraní chmýřité hlavičky, poté se nechávají dozrávat na suchých, dobře větraných místech. Po usušení se šišťice vymlátí a zbaví zbylého chmýru. V lidovém léčitelství se využíval i list, kořen jen zřídka. Pro další zpracování se semena používají celá nebo se melou, drtí. Z ostropestřce se připravuje výluh. Vzhledem k termolabilitě látek se doporučuje droga konzumovat za studena. Výhonky i kořeny se konzumovaly syrové, vařené nebo se zapékaly. Listy se opracovaly jako obdoba špenátu. Báze květů se stonky se oloupaly, pro zbavení hořkosti namočily přes noc a poté používaly jako obdoba artyčoku [1,2,47].

2.1.5 Jestřabina lékařská (*Galega officinalis*)

- Říše: Rostliny (*Plantae*)
- Podříše: Cévnaté rostliny (*Tracheobionta*)
- Oddělení: Krytosemenné (*Magnoliophyta*)
- Třída: Vyšší dvouděložné (*Rosopsida*)
- Řád: Bobotvaré (*Fabales*)
- Čeleď: Bobovité (*Fabaceae*)
- Rod: Jestřabina (*Galega*)
- Druh: Jestřabina lékařská (*Galega officinalis*)

Pojmenování celého rodu (*Galega*) pochází již z antického Řecka. Pastevci věřili, že spásání jestřabiny podporuje produkci mléka u hospodářských zvířat. Název vznikl spojením řeckých slov gala-mléko a agó-přinášet [46,47].

Původním stanovištěm jestřabiny byla jižní a jihovýchodní Evropa. U nás se pěstovala jako pícnina, dnes roste volně na loukách, okrajích cest, březích vod. Lodyha je lysá, v dolní části větvená. Listy jsou lihozpeřené, střídavé, řapíkaté, jednotlivé lístky mají podlouhlý až kopinatý tvar. Bylina celkově dorůstá až 100 cm. Kvete od července do září. Květenství tvoří hrozen o 15-40 květech. Ty tvoří zvonkovitý pěticipý kalich bílé, namodralé či nařialovělé barvy. Plodem je okolo 4 cm dlouhý mnohosemenný lusk [46-48].



Obr. 5 Jestřabina lékařská (*Galega officinalis*) [49]

2.1.5.1 Chemické složení

Jestřabina lékařská poutá pozornost především pro svůj obsah alkaloidů (0,1-0,2 %). V bylině byly identifikovány hlavně deriváty guanidinu: galegin, hydroxyl-4-galegin, synthalin A, synthalin B, biguanid, metformin, buformin. Mezi další patří deriváty chinazolinu: peganin a 2,3-dioxy-chinazol-4-on [46,50]. Nadzemní část obsahuje také galuteolin, flavonoidy (kempferol, quercetin, rutin), taniny, hydroxycinnamové kyseliny, saponiny, hořčiny, pektiny, řadu esenciálních aminokyselin, vitaminy (karoteny, kyselina

askorbová). Dalšími látkami, které nejsou ze skupiny alkaloidů, jsou fytol, ethyl ester kyseliny palmitové, fytosteroly (kampesterol, stigmasterol), α -amyrin [50].

Tab. 9 Chemické složení a výživové údaje jestřabiny lékařské v období rozkvětu [51].

Parametr	Naměřená hodnota v 1 kg
Sušina	157,4 g
Organické látky	898,9 g
Hrubý protein	126,5 g
Etherový extrakt	22,5 g
Popel	101,1 g
Neutrálně detergentní vláknina	464,6 g
Acidodetergentní vláknina	338,6 g
Lignin	67,4 g
Hrubá energie	17,5 MJ
Energetická hodnota	6,18 MJ

2.1.5.2 Aromaticky aktivní látky jestřabiny

Dosud nebyla publikována práce zabývající se obsahem AAL v této rostlině. Jestřabina lékařská se používá jako bylinný prostředek pro stimulaci laktace. Mezi složky jiných bylin se stejným účinkem na organismus patří α -tujen, α -pinen, sabinen, myrcen, kadiden, eudesmol, bisabolol, bisabolen a kubenen [52]. Můžeme tedy předpokládat, že by se tyto AAL mohly nalézat také v jestřabině.

2.1.5.3 Vlastnosti a účinky

Hlavními biologicky aktivními látkami jestřabiny jsou alkaloidy, zejména deriváty guadinu [13].

Jestřabina lékařská byla již ve středověku používána pro léčbu cukrovky. Ve 20. století se zvýšil zájem o účinné látky tohoto přírodního léku. V roce 1994 FDA schválila využití metforminu pro výrobu léčiv diabetu. Ten je schopen normalizovat hladinu glukózy v krvi. Přesný mechanismus zatím není popsán. Účinek se projevuje především potlačením výdeje glukózy játry. Inhibice glukoneogeneze má za následek až 75% snížení výdeje glukózy do krve. Metformin neindukuje hypoglykémii. Klinické studie ukazují, že monoterapie snižuje u pacientů hladinu glukózy v krvi o 3-4mmol.l⁻¹ (na lačno) [53].

Při používání léčiv obsahující metformin se může vyskytnout nežádoucí efekt v podobě průjmu, plynatosti, břišních potíží, nauzei. Tento vedlejší účinek je závislý na podávané dávce léku. Více než 50 % jedinců toleruje maximální dávku, avšak 5-10 %

musí léčbu přerušit. Další komplikací, která se může objevit, je laktátová acidóza. Vyskytuje se jen ve vzácných případech, ale může mít fatální následky [54].

FDA vede jestřabinu lékařskou na seznamu možných jedovatých rostlin. Při studii akutní a subchronické toxicity u potkanů byly podávány zvířatům orálně čtyři různé dávky rostlinné suspenze. Pokus akutní toxicity trval 14 dnů, zjištěná hodnota byla $LD50 > 5\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$. Druhý pokus se vyhodnocoval po 90 dnech. U potkanů bylo zaznamenáno zvýšení cholesterolu, kreatinfosfokinázy, laktátdehydrogenázy a celkového konjugovaného bilirubinu v séru. Naopak se snížilo množství vápníku, albuminu, hematokritu, počet krevních destiček. Mikroskopicky byly pozorovány sinusové kongesce na játrech [55].

2.1.5.4 Sběr a použití

Z vytrvalé rostliny se odřezávají přibližně 20 cm dlouhé části natě. Sběr probíhá na začátku rozkvětu byliny. Jestřabina kvete od července do srpna. Usušená droga se používala ve formě nálevu v domácím léčení pro léčbu diabetu II. typu. Infúze se přidávala do mastí na ekzémy. Spařené listy se jedly na zeleno na způsob špenátu. Toto využití se příliš nedoporučuje vzhledem k možné toxicitě. V kosmetice se přidává do koupelových přípravků. Ve střední Evropě byla jestřabina původně pěstována především jako kulturní plodina. V minulosti se používala hojně jako pícnina pro poměrně vysoký obsah bílkovin a přidávala se mléčnému dobytku do krmiva. Dnes se využívá jako tzv. zelené hnojení, obohacuje půdu organickou hmotou a pomáhá vázat atmosférický dusík [46-48].

2.2 Potenciálně alergenní aromatické látky

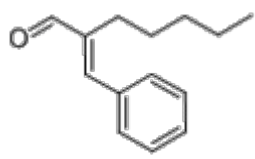
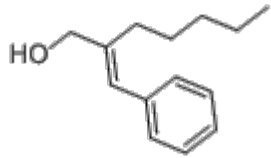
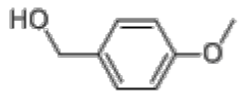
Jak už bylo zmíněno, řada aromaticky aktivních látek má nejen příznivé účinky, ale vyskytují se i negativní dopady na lidský organismus. Složky aroma se mohou projevat dráždivě, mají senzibilační schopnosti, karcinogenní (podporují rakovinné bujení), teratogenní vlastnosti (poškozuji plod) [63]. Osob citlivých na potenciální i prokázané alergeny stále roste, toto číslo je momentálně odhadováno přibližně na 1-4,2 % populace vyspělého světa. Problémem je, že negativní účinek se může vyskytnout i při velice nízkých koncentracích AAL ve výrobku [64].

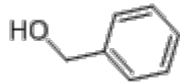
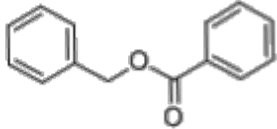
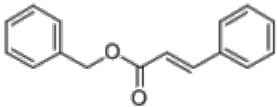
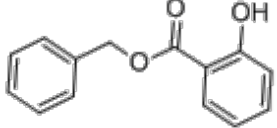
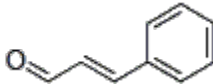

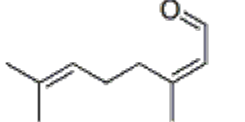

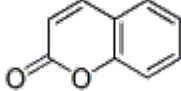
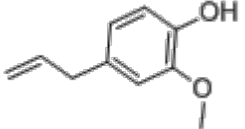
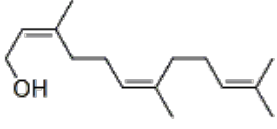

V dnešní době není dodání aroma do potravin nic neobvyklého. Pravidla a možnosti použití jednotlivých aromat reguluje Nařízení ES 1334/2008. Přídavek potenciálně alergizujících vonných látek do potravin není nijak značně regulován, paradoxně se jedná o stejné složky, které jsou zmíněny v omezeních pro kosmetické výrobky. Spotřebitel je informován o přítomnosti přidaného aroma v potravině ve složení či v zákonném názvu potravin, pomocí dodatku „aromatizováno, „s příchutí“ aj. Vonné látky bylin jsou pak

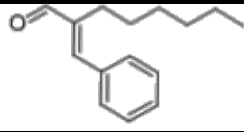
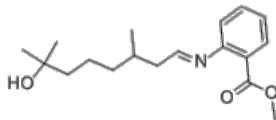
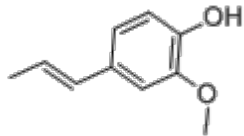
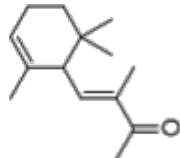
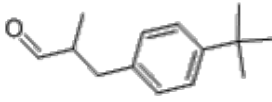
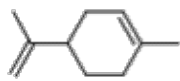
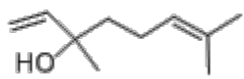
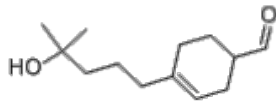

oblíbeny v alkoholovém průmyslu, kde se uplatňují při výrobě lihovin, kořeněných vín a jiných alkoholických nápojů. Existuje řada studií, které již upozorňují na potenciální nebezpečí aromat v potravinách, avšak pozornost je stále věnována spíše hlavním skupinám potravinových alergií [65-67].

Vonné látky našly nezastupitelné místo v kosmetickém průmyslu, což s sebou nese i jistá rizika. Tyto složky jsou jedny z nejčastějších příčin alergií vyvolaných kosmetikou. Počet hlášených reakcí se zvyšuje především u žen, jelikož používají kosmetické přípravky častěji než muži. Průmyslově se používá více než 3000 různých látek, odhaduje se, že z toho přibližně 100 těchto vonných komponentů dokáže vyvolat imunitní odpověď. Alergenní AAL spouští tuto reakci svou vazbou na látku o vyšší molekulové hmotnosti (např. bílkovinu) v kůži. Látky schopné takovéto interakce se označují jako hapteny a mají elektrofilní charakter. Regulaci v oblasti kosmetických přípravků přináší Nařízení ES 1223/2009. V příloze III je v seznamu látek, které mohou být obsaženy pouze při dodržení stanovených omezení, uvedeno 26 potenciálních vonných alergenů. Přesněji se jedná o 24 chemicky definovaných látek a 2 mechové extrakty (tab. 10). Tyto složky musí být zdůrazněny u přípravků, které se neoplachují („*leave on*“) při koncentraci větší než 0,001 % (10 mg.kg⁻¹) a které se oplachují („*rinse off*“) při koncentraci větší než 0,01 % (100 mg.kg⁻¹). V dermatologii se již poměrně rutinně testuje podezření na iritaci vyvolanou AAL. K odhalování kontaktní dermatitidy slouží tzv. fragrance mixy, které tvoří směs definovaných potenciálních alergenů [64,67-69].

Tab. 10 Potencionálně 24 alergenní aromaticky aktivní látky vyjmenované v Nařízení ES 1223/2009 v příloze III [69,70].

PASs INCI název CAS číslo	Synonymum	Struktura
Amyl cinnamal [122-40-7]	(2E)-2-benzylidenheptanal	
Amylcinnamyl alcohol [101-85-9]	(2Z)-2-benzylidenheptan-1-ol	
Anise alcohol [105-13-5]	(4-methoxyfenyl)methanol	

PASs INCI název CAS číslo	Synonymum	Struktura
Benzyl alcohol [100-51-6]	fenylmethanol	
Benzyl benzoate [120-51-4]	benzylbenzoát	
Benzyl cinnamate [103-41-3]	benzyl(2E)-3-fenylakrylát	
Benzyl salicylate [118-58-1]	benzylsalicylát	
Cinnamal [104-55-2]	(2E)-3-fenylakrylaldehyd	
Cinnamyl alcohol [104-54-1]	(2E)-3-fenylprop-2-en-1-ol	
Citral [5392-40-5]	(2Z)-3,7-dimethylokta-2,6- dienal	
Citronellol [106-22-9]	3,7-dimethyloct-6-en-1-ol	
Coumarin [91-64-5]	1-benzopyran-2-on	
Eugenol [97-53-0]	4-allyl-2-methoxyfenol	
Farnesol [106-28-5]	(2E,6E)-3,7,11-trimethyldodeka- 2,6,10-trien-1-ol	
Geraniol [106-24-1]	(2E)-3,7-dimethylokta-2,6-dien-1- ol	

PASs INCI název CAS číslo	Synonymum	Struktura
Hexyl cinnamal [101-86-0]	(2E)-2-benzylidenoktanal	
Hydroxycitronellal [107-75-5]	7-hydroxy-3,7-dimethyloktanal	
Isoeugenol [97-54-1]	2-methoxy-4-[(1E)-prop-1-en-1-yl]fenol	
α-isomethylionon [127-51-5]	(3E)-3-methyl-4-[(1S)-2,6,6-trimethylcyklohex-2-en-1-yl]but-3-en-2-on	
Lilial [80-54-6]	3-(4-terc-butylfenyl)-2-methylpropanal	
Limonen [5989-27-5]	4-isopropenyl-1-methylcyklohexen	
Linalool [78-70-6]	3,7-dimethylokta-1,6-dien-3-ol	
Lyrál [31906-04-4]	4-(4-hydroxy-4-methylpentyl)cyklohex-3-en-1-karbaldehyd	
Methyl-2-octynoate [111-12-6]	methyl okt-2-ynoát	

2.2.1 Charakterizace vybraných vonných alergenů

V této části jsou popsány vlastnosti vonných alergenů, které se vyskytují u léčivých bylin použitých v této studii. Tyto látkou jsou vybrány ze seznamu uvedeného ve zmíněném Nařízení ES 1223/2009.

Amyl cinnamal

Amyl cinnamal je vonná látka vyskytující se nejen v silici květů, ale i černém čaji. Nachází se v květech jasmínu, kterým dodává typickou vůni. Tato žlutá kapalina je rozpustná v olejích a mísitelná s ethanolem. Za přítomnosti vzdušného kyslíku velmi rychle oxiduje, proto musí být chráněn vhodným antioxidantem. Pro svou květinovou vůni se stal oblíbenou součástí kosmetických výrobků pro péči o tělo. Nejčastěji se využívá v pracích prostředcích a avivážích. V potravinářství našel využití především při výrobě cukrovinek. Amyl cinnamal je lehce dráždivý na kůži, mírně toxický při požití. Na potkanech zjištěná LD50 = 3730 mg.kg⁻¹ při požití [70-75].

Amylcinnamyl alkohol

Tato syntetická aromatická látka má podobu čiré až lehce nažloutlé kapaliny. Amylcinnamyl alcohol je nerozpustný ve vodě, ale rozpustný v alkoholu. Díky své vůni po broskvích, banánu a hruškách našel své uplatnění v cukrovinkách a nápojích. Používá se také jako ochucovadlo. V kosmetice se nachází v přípravcích pro péči o tělo, mýdlech a parfémeh, kde přináší lehce jasmínovou vůni. Toxická dávka při požití LD50 = 4000 mg.kg⁻¹ (potkan), při styku s kůží LD50 = 5000 mg.kg⁻¹ (králík) [70,73-76].

Benzyl alkohol

Benzyl alkohol se používá v kosmetickém, potravinářském i farmaceutickém průmyslu. Výrobkům dodává mandlově-ovocnou vůni. Oblíbený je při výrobě likérů, aromatizovaných vín a jiných alkoholických nápojů. Ve složení potravin jej můžeme najít pod označením E 1519. Nepoužívá se jen jako aroma, ale také jako rozpouštědlo či zalévací médium v mikroskopii. Tato bezbarvá až nažloutlá olejovitá kapalina má antiseptické, konzervační a anestetické vlastnosti. Je rozpustná ve vodě, organických rozpouštědlech, olejích, s ethanolem se mísí při pokojové teplotě. LD50 = 1230 mg.kg⁻¹ orálně (potkan), ADI stanovila WHO na 0-5 mg.kg⁻¹. Mezi typické projevy patří zčervenání kůže, očí, při vdechnutí bolesti hlavy doprovázené dráždivým kašlem, po požití bolesti břicha, průjem a zvracení [69,70,73-75].

Benzyl benzoát

Benzyl benzoát se běžně používá kromě aromatizace jako součást insekticidů, změkčovadlo při výrobě celulózy, ale i ve veterinární a humánní medicíně – ektoparazitika. V potravinářství se uplatňuje také jako stabilizátor syntetických ochucovadel. Ve vodách po holení, pleťových tonicích, krémech, deodorantech plní funkci rozpouštědla. Je součástí toluánského balzámu. Vyskytuje se jako bezbarvé krystaly či viskózní kapalina. Projevuje se lehkou balzamicko-mandlovou vůní, která je společná pro aromata s hořkosladkou vůní. Benzyl benzoát je pro člověka relativně netoxický. Při kontaktu s ním dochází k podráždění kůže a očí. Orálně (králík): LD50 = 1680 mg.kg⁻¹, kůže (králík): LD50 = 4000 mg.kg⁻¹ [70,73-75].

Benzyl cinnamát

Tato AAL má obdobné využití v kosmetickém průmyslu jako zmiňovaný benzyl benzoát. Má sladkou vůni květů a plodů třešní. Používá se do těžkých, sladkých aromat. Rovněž je součástí toluánského balzámu. Jeho chuť připomíná med. Bílé až lehce nažloutlé krystaly benzyl cinnamátu jsou rozpustné v alkoholu, etheru, olejích, prakticky se nerozpouštějí ve vodě a glycerinu. U člověka slabě dráždí kůži. Zjištěná toxicita u potkanů je LD50 = 5,38 g.kg⁻¹ [70, 73-75].

Benzyl salicylát

Benzyl salicylát se v přírodě nachází v hřebíčku. Izoluje se z éterických olejů. Tato téměř bezbarvá kapalina je běžnou složkou ochranných krémů na opalování, protože dokáže chránit kůži před ultrafialovým zářením. Nejvíce se prosazuje jako organické rozpouštědlo a fixátor. Jsou u něj popsány antipyretické, analgetické účinky – využití ve farmakologii. Vlastní vůně benzyl salicylátu je lehká a příjemná. Akutní toxicita zaznamenaná při pokusech s potkany dosáhla hodnoty LD50 = 2227 mg.kg⁻¹ (orálně), u člověka bylo popsáno hlavně podráždění kůže a očí [70, 73-75].

Citral

Citral je světle žlutá olejovitá kapalina, která se dobře mísí s ethanolem a étherem. V přírodě má běžné zastoupení v silicích rostlin. Vyskytuje se ve dvou izomerech. *Trans* izomer – geranial má výraznou vůni citrusů, neral – *cis* izomer je oproti němu méně výrazný a sladší. Nejtypičtější je pro něj silice citrusových plodů, ale tvoří součást i silice hřebíčku, pepře či zázvoru. Používá se do potravinářských aromat, citrusových olejů, čajových směsí a do různých výrobků ke korekci zápachu. V biotechnologiích se pomocí něj syntetizuje

retinol (vitamin A). Citral je pro člověka toxický při požití, při aplikaci přípravků může být dráždivý na kůži. Při pokusech na potkanech byla zjištěna hodnota $LD_{50} = 4960 \text{ mg.kg}^{-1}$ (orálně) [70,73-75].

Citronellol

Citronellol je hojně rozšířená AAL. Nachází se ve více než 30 rostlinných olejích, v černém čaji a mnoha druzích ovoce. (+)Citronellol se objevuje v poměrně dobře známém oleji citronella jako cejlonský nebo jávský olej. Ve formě (-)citronellol je přítomen i v růžovém nebo geraniovém oleji. Citronellol se používá jako vonná látka do čajových směsí, nápojů, kosmetiky, ke korekci zápachu. Je součástí insekticidních atraktantů a pesticidů. Byly zaznamenány případy podráždění očí, dýchacích cest a kůže. Zjištěná toxicita u potkanů je $LD_{50} = 3450 \text{ mg.kg}^{-1}$ [70,73-75].

Geraniol

V přírodě se vyskytuje ve většině rostlin – růže, pelargonie, levandule, jablka, meruňky, hroznové víno, med, citron. Získává se ze silic citronelové nebo palmorůžové. Lze jej připravit i syntetickou cestou. Je jednou z nejčastěji používaných vonných látek. Má podobu nažloutlé, olejovité kapaliny rozpustné v alkoholu, etheru a většině organických rozpouštědel. Pro svůj antiseptický účinek se přidává do řady mastí či stomatologických přípravků. Do výrobků přináší vůni růže s citrusovými nebo ovocnými tóny. Geraniol nemá elektrofilní povahu, ale snadno podléhá autooxidaci. Produkty těchto reakcí pak mohou být vysoce alergenní sloučeniny. Toxická dávka (orálně) u potkana byla stanovena $LD_{50} = 3600 \text{ mg.kg}^{-1}$. Běžně se používá i v potravinářském průmyslu jako aroma – jablko, broskev, meruňka. Limit ADI pro člověka nebyl stanoven [70,73,74,77].

Hexyl cinnamal

Hexyl cinnamal je čirá, žlutá kapalina chemicky podobná amyl cinnamalu. Jeho vůně byla popsána jako delikátní květinová s jasmínovými tóny. Hexyl cinnamal našel široké uplatnění v kosmetickém a chemickém průmyslu od mýdel, šampónů, deodorantů, pěn do koupele, po čisticí prostředky či detergenty. Získává se z rychle rostoucí liány v Číně, Indii nebo se synteticky vyrábí kondenzací benzaldehydu s oktanalem. Při vdechnutí většího množství byly popsány reakce organismu podobné astmatu, které přetrvávají měsíce někdy i roky v závislosti na vdechnuté dávce. Orální toxicita byla změřena u králíka $LD_{50} = 2100 \text{ mg.kg}^{-1}$, u myši $LD_{50} = 1100 \text{ mg.kg}^{-1}$ [70,73,74,78].

α -isomethyl ionon

V koncentrovaném stavu má podobu čiré, bezbarvé až žluté kapaliny. Je nerozpustný ve vodě. V přírodě se nevyskytuje, jedná se o čistě synteticky vyrobenou vonnou látku. Hojně se aplikuje do parfémovaných kosmetických výrobků včetně spotřební chemie jako prací prostředky. Řadí se mezi květinové vůně, ale je mu připisována i vůně borovicového jehličí. α -isomethyl ionone vykazuje poměrně slabší toxicitu oproti ostatním potenciálně alergickým AAL. Při požití bylo potřeba daleko vyšších dávek k dosažení akutní otravy – testováno na myších s $LD_{50} = 10 \text{ g.kg}^{-1}$ [70,73,74,79].

Limonen

Limonen se získává izolací z citrusových terpenů (citrón, limetka, pomeranč). Tato bezbarvá kapalina snadno oxiduje a mění svou původní vůni na ne zcela příjemné až kmínové aroma. Typická je pro něj i autooxidace, která způsobuje nestabilitu šťáv z citrusových plodů. V přírodě se vyskytuje především v opticky aktivních formách, racemická směs isomerů se nazývá dipenten. Každý isomer limonenu má jiné aroma. (R)-(+)-limonen má charakteristickou vůni citrusových plodů, (S)-(-)-limonen se nachází v silici jedle bílé. Může dráždit kůži, dýchací cesty, oči, nicméně je považován za bezpečnou přísadu (GRAS). WHO doporučila ADI na $75 \mu \text{ g.kg}^{-1}$ při použití jako aditivní látky do potravin, pro celkový příjem pak je stanovena ADI 0-1,5 mg.kg^{-1} tělesné váhy. Většina lidmi přijímaného limonenu pochází z přírodních zdrojů (ovoce). V potravinářství se přidává do cukrovinek, mražených krémů. Pro svou příjemnou vůni má nenahraditelné místo v kosmetickém průmyslu především jako parfemační složka řady výrobků [70,72-74].

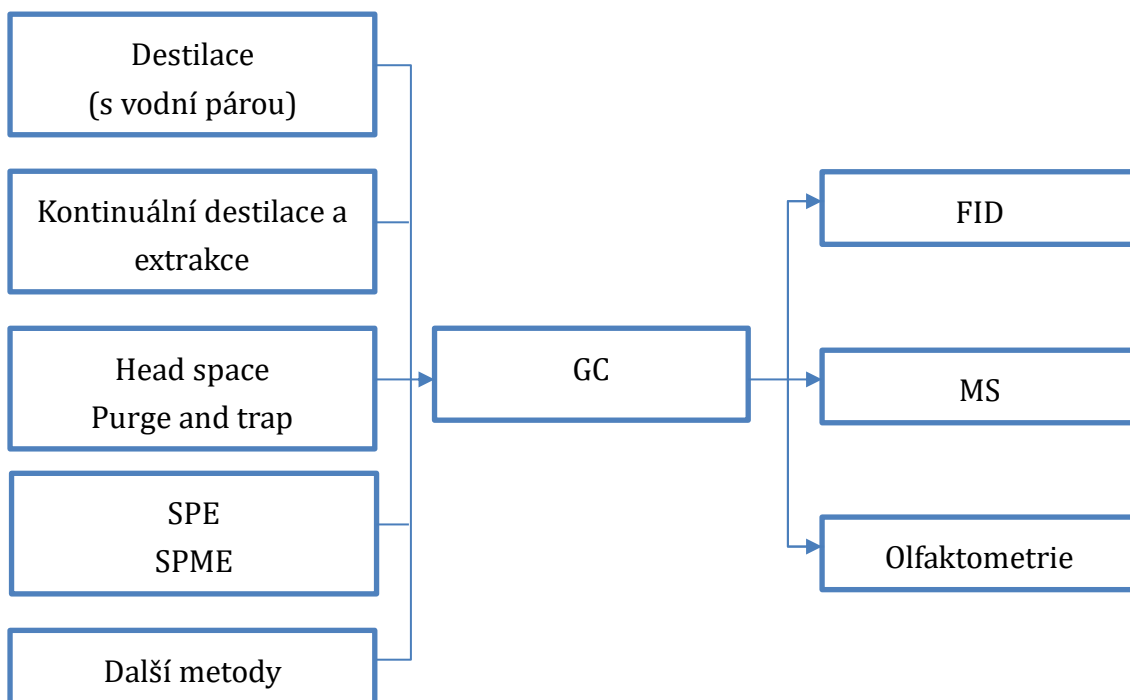
Linalool

Linalool je bezbarvá až světle žlutá kapalina získávaná ze silic, popřípadě syntetickou cestou. Nachází se v koriandrové silici, byl identifikován i v jablečné, pomerančové šťávě. V přírodě má hojné zastoupení od meruněk, broskví, jahod, přes majoránku, tymián až po levanduli. Rozpouští se v glykolu a parafinovém oleji. Jeho aroma je popsáno jako květinové až konvalinkové s dřevitými tóny. To mají na svědomí isomery (R)-(-)-linalool s intenzivní dřevitou vůní a (S)-(+)-linalool se sladkou vůní po levanduli. V kosmetice se používá hojně pro parfemaci výrobků, ale i přímo do parfémů. Má velmi malou senzibilizační schopnost, jelikož nemá elektrofilní charakter. Kůži dokáže podráždit především produkty jeho autooxidace. JECFA stanovila rozpětí ADI na 0-0,5 mg.kg^{-1} tělesné váhy. Pro účely aromatizace byl označen jako bezpečný (GRAS) [64, 70,72-74].

2.3 Možnosti stanovení AAL

I přes dnešní moderní techniky bývá stanovení AAL v bylinách stále dosti komplikované. Zatím neexistuje univerzální metoda, která by spolehlivě identifikovala vonné látky v matrici. Analýzy se typicky ubírají směry zjištění celkového aromatického profilu, hledáním konkrétní vonné látky či porovnáním skupiny vzorků [80].

V současné době je snaha minimalizovat používání organických rozpouštědel s ohledem na životní prostředí. Zdlouhavé postupy vyžadující velké množství chemikálií vytěsňují nové instrumentální techniky, které jsou automatizovatelné a méně časově náročné. Typickými zástupci těchto technik jsou mikrovlnná extrakce, mikroextrakce na pevnou fázi či extrakce pomocí nadkritické tekutiny [81,82]. Stanovení aromaticky aktivních látek se dá rozdělit do dvou fází. Izolační fáze závisí na těkavosti a rozpustnosti hledaných sloučenin. Jejím cílem je získat reprezentativní složky ze vzorku. Druhá fáze detekční má za úkol separaci a vlastní identifikaci látek [83,84]. Díky nízkému bodu varu AAL se jednou z nejoblíbenějších technik stala plynová chromatografie (GC). Ta se často kombinuje s plamenově ionizačním detektorem (FID) či tepelně vodivostním detektorem (TCD). Nemálo se objevuje i hmotnostní spektrometrie (MS). Detektor tohoto typu poskytuje poměrně vysokou citlivost a selektivitu oproti ostatním detektorům. Díky těmto vlastnostem se uplatňuje při stanovení profilu vonných látek. Ostatní spektroskopické analytické techniky jako UV/VIS, FTIR, NMR poskytují údaj o kvalitě. Pro rychlou identifikaci jednoduchých a komplexních vonných látek se využívá NIR [85,86]. Kapalinová chromatografie se využívá pro stanovení málo těkavých, vysokomolekulárních i teplotně nestabilních sloučenin. [85,87] Pro účely parfumerie je nepostradatelnou součástí senzorická analýza pomocí olfaktometrie (GC-O). Konec GC kolony je rozdvojený a umožňuje hodnotiteli popsat vůně či pachy při současném monitorování píků v chromatogramu [85,86].



Obr. 6 Ukázka možných způsobů identifikace aromaticky aktivních látek [88].

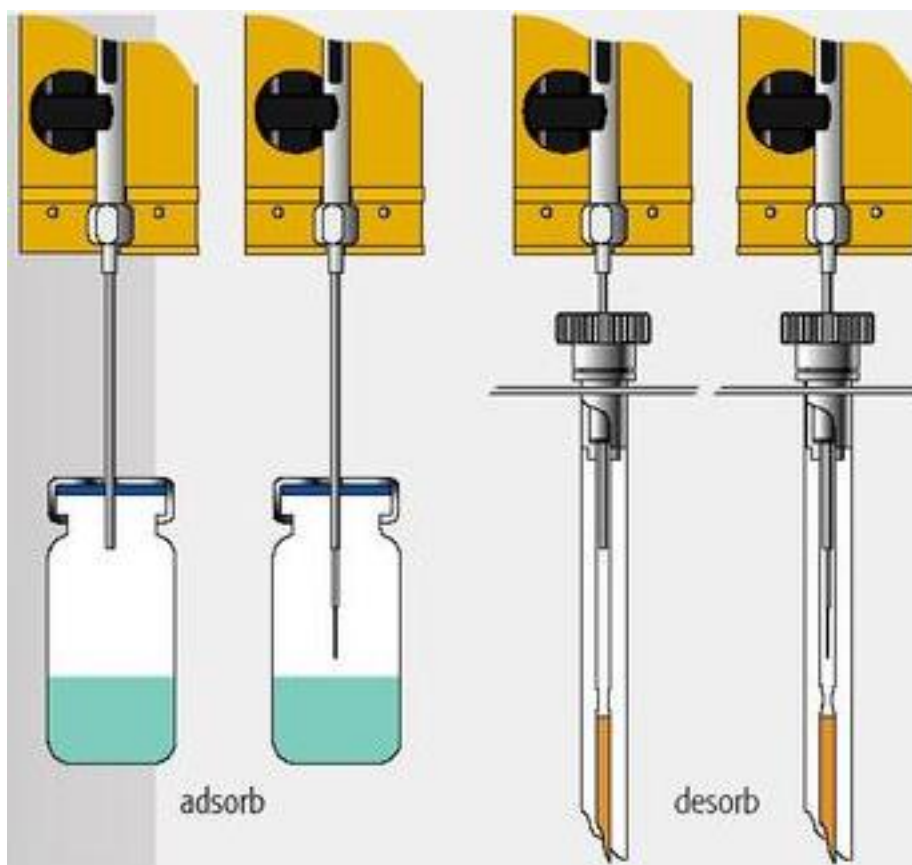
2.3.1 Metoda SPME-GC-MS

Při této práci byla pro stanovení AAL v léčivých bylinách byla použita plynová chromatografie s hmotnostní detekcí. Pro extrakci vonných těkavých látek z matrice byla zvolena mikroextrakce pevnou fází (SPME).

2.3.1.1 Mikroextrakce pevnou fází

SPME je poměrně rychlá sorpčně-desorpční technika. Dochází zde k zakoncentrování analytu bez potřeby rozpouštědel. Složky ze vzorku se sorbují na stacionární fázi, upevněné na křemenném vláknu, které chrání kovová jehla (viz obr. 7). Jehla slouží nejen jako ochranný prvek, ale také propichuje septum vialky s nachystaným vzorkem. Principem SPME metody je dosažení rovnovážného stavu mezi koncentrací složek ve vzorku, prostorem nad vzorkem a polymerní vrstvou vlákna. Množství sorbovaného vzorku ovlivňuje tloušťka sorpční vrstvy a distribuční konstanta [89,90].

V této studii byla použita HS-SPME („headspace“ metoda). Je to technika, kdy se vlákno umístěné ve vialce nachází v prostoru nad vzorkem (viz obr. 7). Dále existují varianty s ponořeným vláknem do vzorku (DI-SPME „direct immerse“) a membránově chráněná extrakce („membrane protected mode“). Při této je extrakční fáze oddělena od vzorku membránou [90].



Obr. 7 První dvojice názorně ukazuje propíchnutí septa vialky kovovou jehlou a sorpci analytu v prostoru nad vzorkem na polymerní vrstvu vlákna. Druhá dvojice desorpci získaných látek ve injektoru chromatografu [91].

2.3.1.2 Spojení GC-MS

Použití hmotnostní spektrometrie se ukázalo jako užitečné pro identifikaci neznámých složek vzorku. Spojení GC-MS potlačuje nevýhody obou technik a tím umožňuje analýzu složitých směsí. Chromatografie zajišťuje separaci jednotlivých složek, MS detektor poskytuje informace potřebné k identifikaci a případné kvantifikaci složky. Pro každou složku je zaznamenán pík v chromatogramu a k němu příslušné hmotnostní spektrum látky. Spektra je poté možno vyhodnotit pomocí knihovny spekter uložené v počítači. Díky této technice nedochází ke zkreslení výsledků, kdy dvě různé složky mohou mít stejný retenční čas [89,92].

3 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

Pro charakterizaci aromatických látek v léčivých bylinách byla zvolena metoda SPME-GC-MS. Metoda se již osvědčila při několika pracích, je zavedena a využívána na ÚCHPBT. Kritéria analýzy jsou upravena dle podmínek vzorků a nových poznatků v této oblasti (viz. kapitola 3.4). Původní metodika sloužila pro stanovení AAL v sýrech. Pro tuto studii byla provedena optimalizace parametrů vzhledem k bohatšímu aromatickému profilu bylin.

Pro tento výzkum byly převzaty podmínky z předcházející studie, diplomové práce Ester Pecinové [93]. V použité metodice, na základě poznatků analýz s obdobnou problematikou, byl prodloužen čas analýzy oproti předešlé práci. Tím se dosáhlo podchycení většího spektra potenciálně alergenních aromatických látek obsažených ve vzorcích.

3.1 Analyzované vzorky

V této práci bylo analyzováno 5 druhů vybraných léčivých rostlin, konkrétně meduňka lékařská (*Melissa officinalis*), měsíček lékařský (*Calendula officinalis*), šalvěj muškátová (*Salvia sclarea*), jestřabina lékařská (*Galega officinalis*), ostropestřec mariánský (*Silybum marianum*). Tyto byliny byly vypěstovány v Centru léčivých rostlin Lékařské fakulty Masarykovy univerzity na Kraví Hoře v Brně (280 m.n.m., 49°12'3,36"S, 16°35'4,74"V). Sběr a zpracování probíhalo v červnu roku 2016. Rostliny byly sklizeny, nastříhány. Sušily se na lískách v uzavřené tmavé místnosti proudícím vzduchem o teplotě 25–30 °C přibližně 1 týden do dosažení konstantní hmotnosti.

V naší laboratoři byly usušené byliny rozdrceny v třecí misce. Tento krok napomáhá uvolnění těkavých silic díky narušení buněk a kanálků obsahujících tyto látky. Pro vlastní analýzu bylo odebráno do vialky o objemu 10 ml 0,5 g (váženo s přesností na 4 desetinná místa) rozdrcené rostliny.



Obr. 8 Příprava vzorků k analýze – Fotka vlevo znázorňuje vlastní přípravu byliny pro stanovení. Fotka vpravo jsou vlastní analyzované léčivé byliny použité v této studii. Mimo přípravu byly vzorky uschovávány na tmavém místě bez přístupu světla.

3.2 Laboratorní vybavení

3.3.3 Technické vybavení

- Plynový chromatograf TraceTM 1310 se split/splitless injektorem (Thermo Fisher Scientific Inc., Waltham, MA, USA)
- Hmotnostní detektor ISQTM LT Single Quadrupole (Thermo Fisher Scientific Inc., Waltham, MA, USA)
- Knihovna spekter NIST/EPA/NIH, Verze 2.0 (Gaithersburg, Maryland, USA)
- Analytické digitální váhy HELAGO, GR-202-EC, Itálie

3.2.1.1 Plyny

- Helium, čistota 4.8, v tlakové lahvi s redukčním ventilem (SIAD, Česká republika)

3.2.2 Ostatní pomůcky

- SPME vlákno DVB/CAR/PDMS 50/30 μm , Supelco, Bellefonte, Pennsylvania, USA
- Vialky o objemu 10 ml se šroubovacím magnetickým uzávěrem
- Mikropipety Biohit Proline (0,5–1000 μl), špičky
- Mikrostříkačka Hamilton (0,2–100 μl), Bonaduz, Švýcarsko
- Běžné laboratorní sklo a pomůcky

3.3 Podmínky analýzy pomocí SPME-GC-MS

3.3.1 SPME extrakce

- Navážka vzorku: 0,5 g
- Doba inkubace (temperování): 10 min
- Teplota extrakce a inkubace (teplota agitátoru): 40 °C
- Agitátor zapnutý 5 s, vypnutý 60 s
- Doba extrakce: 20 min
- Hloubka ponoření vlákna do vialky: 20 mm

3.3.2 GC-MS analýza

- Kapilární kolona TG-WaxMS (30 m x 0,25 mm x 0,5 μm)
- Teplota injektoru (desorpce): 240 °C
- Doba desorpce: 20 min
- Dávkování splitless, ventil uzavřen 10 min
- Hloubka ponoření vlákna do injektoru 40 mm
- Nosný plyn helium, průtok 1 ml·min⁻¹
- Teplotní program: 40 °C s výdrží 2 min, vzestupný gradient 3 °C·min⁻¹ do 110 °C

s výdrží 10 min, dále vzestupný gradient $3\text{ }^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ do $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ s výdrží 0 min, celková doba analýzy je 92 min

- Hmotnostní detektor v módu EI, energie ionizačních elektronů 70 eV, teplota iontového zdroje $200\text{ }^{\circ}\text{C}$, analyzátor jednoduchý kvadrupól, skenovací rozsah m/z 30–370 amu, rychlost skenování 0,2 s

3.4 Vyhodnocení výsledků SPME-GC-MS analýzy

Pro detekci AAL byl každý vzorek podroben analýze dvakrát ($n=2$). K vyhodnocení získaných záznamů byl použit program Xcalibur 2.2 (Thermo Scientific Inc., Waltham, MA, USA). Jednotlivé aromaticky aktivní složky byly identifikovány na základě srovnání hmotnostních spekter s knihovnou spekter (Knihovna spekter NIST/EPA/NIH, Verze 2.0, Gaithersburg, Maryland, USA).

U alergenních látek byla identifikace potvrzena srovnáním retenčních časů s retenčními časy dostupných standardů.

Srovnání jednotlivých chemických skupin sledovaných látek bylo provedeno semikvantitativně na základě ploch píků.

3.5 Zpracování výsledků

Získaná data byla zpracována pomocí programu MS Excel 2010. U všech vzorků byly vytvořeny tabulky pro možnost srovnání naměřených hodnot, vypočítáno procentuální zastoupení a porovnání s již publikovanými studii.

4 VÝSLEDKY A DISKUZE

Identifikace aromaticky aktivních látek ve vzorcích bylin byla provedena na základě srovnání hmotnostních spekter s dostupnou knihovnou spekter.

Obsah veškerých těkavých látek ve vzorcích byl sledován z hlediska kvalitativního. Pro určitou představu o obsahu sloučenin (funkčních skupin) byl použit semikvantitativní přístup na základě ploch píků. Vzhledem k velkému množství stanovených vonných látek a komplexnosti matrice by bylo vhodné ke kvantitativnímu popisu aromatického profilu použít metodu vnitřního standardu, případně standardního přídatku. Navazující práce by mohly pomoci s výběrem vhodné metody kvantifikace.

Díky prodloužení celkové doby analýzy se podařilo podchytit širší spektrum vonných látek ve vzorcích. V původní metodice trvala analýza 65 minut [93]. Při této práci byl celkový čas 92 minut. Výsledkem je identifikace dalších 5 potenciálně alergenních vonných látek – hexylcinnamalu, benzyl benzoátu, benzyl salicylátu, benzyl alkoholu a benzyl cinnamátu, s retenčními časy v rozpětí mezi 65. až 86. minutou analýzy. Nicméně takto dlouhá analýza není z hlediska rutinního použití žádoucí a další experimenty budou proto zaměřeny na její urychlení při zachování pokud možno kvalitního rozdělení složek.

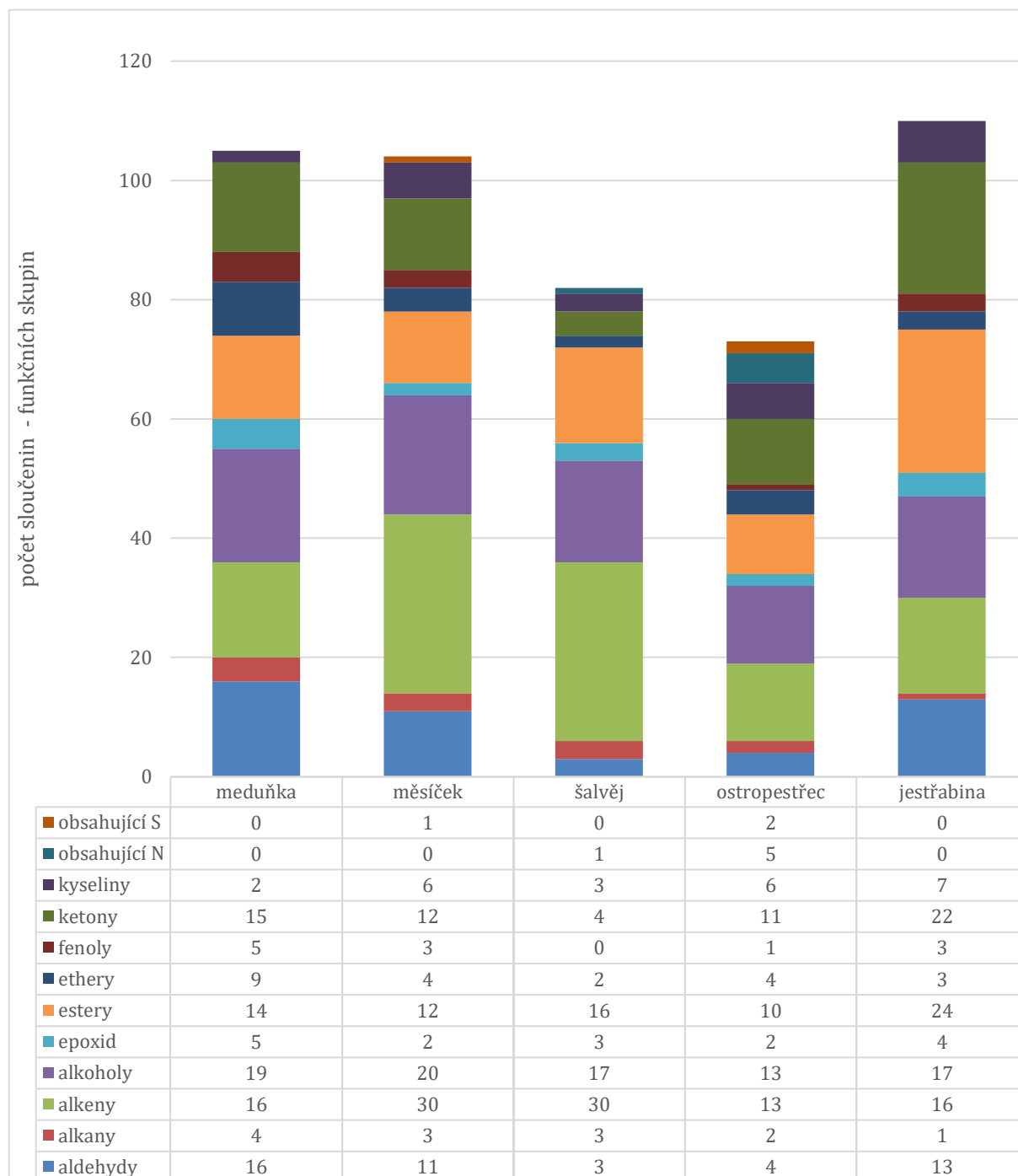
Celkem bylo v 5 vzorcích identifikováno 477 AAL. Z toho bylo 12 různých potenciálně alergenních sloučenin. U všech vzorků byl identifikován benzyl salicylát. Pro každou bylinu byla vypracována tabulka s identifikovanými AAL. Tabulky obsahují název sloučeniny, doplněný o systematický název, retenční čas, pravděpodobnost (P) shody s knihovnou spekter, zařazení podle obsažené funkční skupiny a citace souvisejících již publikovaných prací.

Tab. 11 Počet identifikovaných AAL v jednotlivých vzorcích bylin.

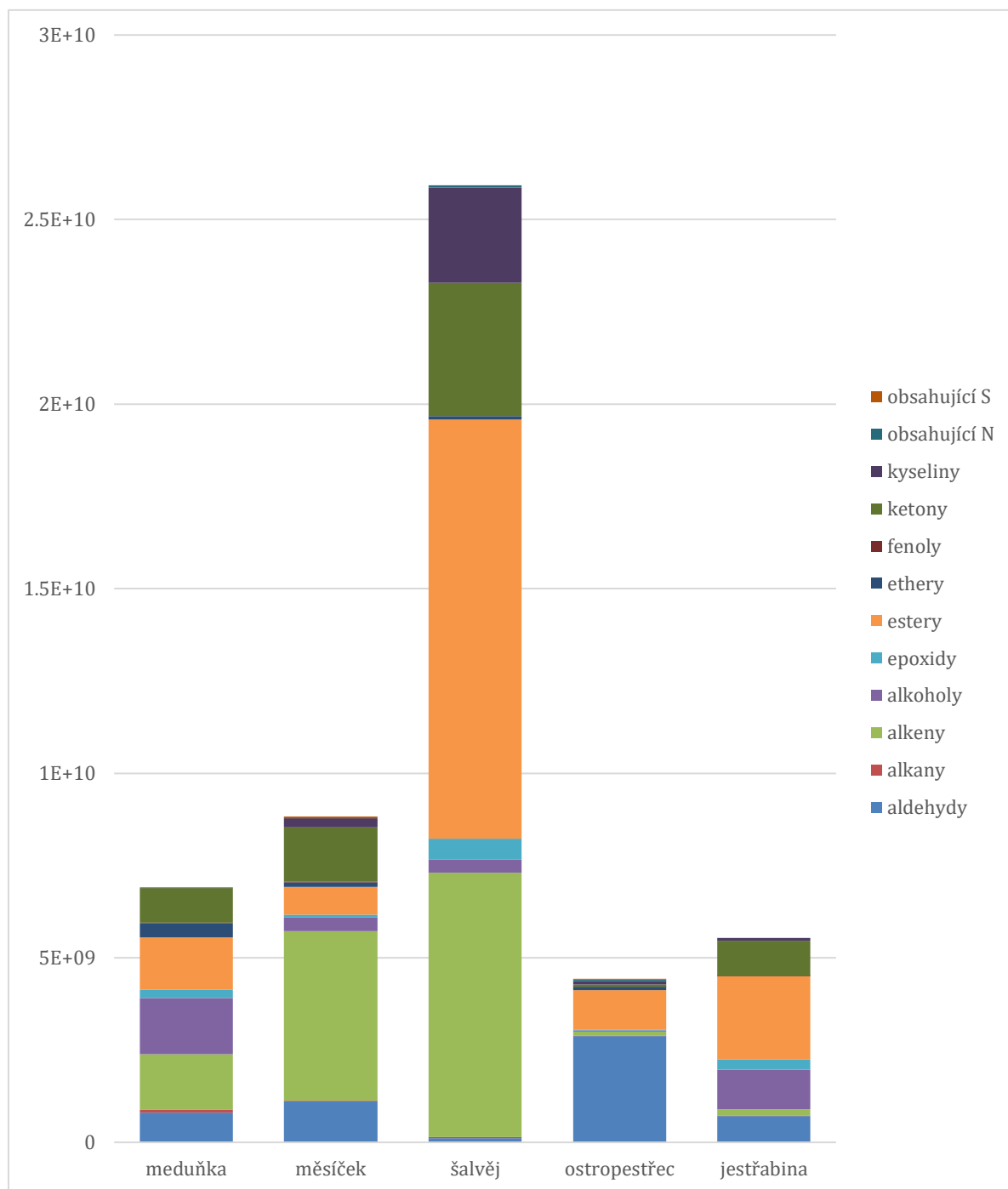
meduňka	měsíček	šalvěj	ostropestřec	jestřabina
106	104	82	73	110

Rozdělení vonných látek podle jejich funkčních skupin je znázorněno grafem č. 1 doplněným o tabulku jednotlivých počtů sloučenin. Nejvíce byly zastoupeny alkeny, alkoholy a estery, naopak nejméně bylo látek obsahujících síru nebo dusík. V jestřabině ani v meduňce se nenacházely žádné látky obsahující tyto dva prvky. Nejstabilnější se jeví obsah alkanů, který je v rozpětí 3-4 %, výjimku tvoří pouze jestřabina se zastoupením 1 %. U měsíčku a šalvěje bylo identifikováno 30 komponent ze skupiny alkenů, což je přibližně dvojnásobné množství než u meduňky a jestřabiny a 2,3 krát více než u ostropestřce. Nejvíce kyselin, ketonů, esterů obsahovala jestřabina. Meduňka měla nejvyšší obsah fenolů, etherů, epoxidů a alkanů s aldehydy. Měsíček obsahoval ze všech bylin nejvíce alkoholických sloučenin.

Graf 1 Zastoupení jednotlivých sloučenin dle obsahu funkční složky vzhledem k původu vzorku. Sloupcový graf znázorňuje rozložení typu vonných látek a je doplněn tabulkou s barevnou legendou s přesnými hodnotami jednotlivých skupin.



Graf 2 Porovnání obsahu jednotlivých chemických skupin identifikovaných sloučenin. Obsah byl stanoven semikvantitativně na základě ploch piků. Plochy byly získány jako aritmetický průměr dvou měření.



4.1 Meduňka lékařská

V meduňce bylo identifikováno 106 AAL, z toho 8 se řadí mezi potenciální vonné alergeny. 15 sloučenin bylo již popsáno při jiných studiích aromatického profilu této byliny. Nejčastější skupinou látek meduňky byly alkoholy 18 % (19), nejméně zastoupeny pak byly karboxylové kyseliny 2 % (2). Poměr alkenů a aldehydů ve vzorku byl vyrovnaný, množství sloučenin obou těchto skupin dosáhlo 15 %. V meduňce, stejně jako v jestřabině, nebyly zachyceny žádné sloučeniny obsahující dusík nebo síru.

Při kvantifikaci by bylo zajisté vhodné zaměřit se na určení množství citralu ve vzorku, který bývá označován jako majoritní složka EO. V této práci byl citral identifikován s R_T 41,93 min. Citral navíc patří mezi potenciální alergeny.

Kompletní seznam identifikovaných sloučenin je uveden v tabulce č. 12. Grafy č. 1 a 2 popisují kompletní zastoupení jednotlivých skupin sloučenin. V příloze 1 je vložen chromatogram analýzy vzorku meduňky.

Tab. 12 Aromaticky aktivní látky identifikované v meduňce lékařské.

Meduňka lékařská						
Č.	Látka	Systematický název	R _T [min]	P	Publikace	Skupina
1	kamfen	2,2-dimethyl-3-methylenbicyklo[2.2.1]heptan	8,30	*		alkan
2	dodekan		8,85	*		alkan
3	hexanal		9,22	**		aldehyd
4	4,4-dimethyl-2-cyklohexen-1-ol		10,10	*		alkohol
5	hex-1-en-3-ol		12,21	*		alkohol
6	β -myrcen	7-methyl-3-methylenokta-1,6-dien	12,32	****	[10]	alken
7	1-heptanal		13,29	**		aldehyd
8	limonen	1-methyl-4-(1-methylethenyl)cyklohexen	13,65	****	[9,10]	alken
9	eukalyptol	1,3,3-trimethyl-2-oxabicyklo(2.2.2)oktan	13,94	**		ether
10	2-trans-hexanal		14,73	*		aldehyd
11	2-amylfuran		15,21	*		ether
12	trans- β -ocimen	(3E)-3,7-dimethylokta-1,3,6-trien	15,37	*		alken
13	2-methyl-6-heptanon		15,45	**		keton
14	cis-4-hepten-1-al		15,74	*		aldehyd
15	3-karen	3,7,7-Trimethylbicyklo[4.1.0]hept-3-en	16,06	****	[12]	alken
16	3-oktanon		16,18	*		keton
17	myroxide	2,2-dimethyl-3-(3-methylpenta-2,4-dienyl)oxiran	16,43	*		ether
18	o-cymen	2-isopropyl-1-methylbenzen	16,83	*		alken
19	n-pentadecane		17,40	*		alkan
20	acetoin	3-hydroxy-2-butanon	17,66	*		keton
21	2,2,6-trimethylcyklohexanon		18,80	*		keton

22	6-methyl-5-heptene-2-on		19,85	****	[9,10,12]	keton
23	rose oxid	4-Methyl-2-(2-methylprop-1-en-1-yl)tetrahydro-2H-pyran	20,33	****	[12]	ether
24	bergamal	2,6-dimethyl-5-heptanal	20,49	**		aldehyd
25	2-isopropenyl-5-methyl-4-hexenal		21,19	*		aldehyd
26	α -pyronen	1,5,5,6-tetramethyl-1,3-cyklohexadien	21,35	*		alken
27	myrtenylmethyl ether	2-(methoxymethyl)-6,6-dimethylbicyklo[3.1.1]hept-2-en	21,44	*		ether
28	okt-1-enyl acetát		21,55	*		ester
29	cis-3-hexen-1-ol		21,82	*		alkohol
30	oktan-3-ol		22,16	**		alkohol
31	rosefuran	3-methyl-2-(2-methyl-2-butenyl)-furan	22,61	*		ether
32	2-hexenol		22,78	*		alkohol
33	tetrahydrolinalool	3,7-Dimethyl-3-oktanol	23,75	*		alkohol
34	cis-linalool oxid	2-Methyl-2-vinyl-5-(2-hydroxy-2-propyl)tetrahydrofuran	24,16	*		epoxid
35	okt-1-en-3-ol		24,60	**		alkohol
36	p-menthan-3-one	2-Isopropyl-5-methylcyclohexanone	25,05	*		keton
37	trans-linalool oxid	trans-2-Methyl-2-vinyl-5-(1-hydroxy-1-methylethyl)tetrahydrofuran	25,37	*		epoxid
38	octová kyselina		25,57	**		karboxylová k.
39	citronellal	3,7-Dimethyl-6-octenal	25,84	****	[9,10]	aldehyd
40	α -copaen	(1R,2S,6S,7S,8S)-(-)-8-Isopropyl-1,3-dimethyltricyklo[4.4.0.0 ^{2,7}]dec-3-en	26,09	****	[12]	alken
41	2-ethylhexanol		26,25	*		alkohol
42	2,4-heptadien-1-al		26,64	*		aldehyd
43	bicykloseskvifellandren	1-Isopropyl-4-methyl-7-methylen-1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydronaphthalen	26,99	*		alken
44	trans-chrysantermal	2,2-Dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)cyklopropankarbaldehyd	27,13	*		aldehyd

45	β -bourbonen	(1S,3aS,3bR,6aS,6bR)-1-Isopropyl-3a-methyl-6-methylendekahydrocyklobuta[1,2:3,4]di[5]annulen	27,32	***		alken
46	trans-3, trans-5-oktadien-2-on		27,84	**		keton
47	benzaldehyd		28,13	*		aldehyd
48	β -copaene	Tricyklo(4.4.0.02,7)dekan, 1-methyl-3-methylen-8-(1-methylethyl)-, (1R,2S,6S,7S,8S)-	28,38	*		alken
49	isopinokamfon	2,6,6-Trimethylbicyklo[3.1.1]heptan-3-on	28,93	*		keton
50	linalool	3,7-Dimethylokta-1,6-dien-3-ol	29,26	****	[12]	alkohol
51	bergamol	3,7-dimethylokta-1,6-dien-3-yl acetát	29,70	**		ester
52	methyl citronellát	Methyl 3,7-dimethyl-6-octenoát	30,15	****	[9,10]	ester
53	isoleden	(1aR,4R,7R,7bS)-1,1,4,7-tetramethyl-1a,2,3,4,5,6,7,7b-oktahydrocyklopropa[e]azulen	30,34	*		alken
54	isoeugenol		30,49	*		alkohol
55	octa-3,5-dien-2-on	2-Methoxy-4-propenylfenol	30,69	**		keton
56	β -elemen	(1S,2S,4R)-(-)-1-methyl-1-vinyl-2,4-diisopropenylcyklohexan	31,49	*		alkan
57	β -karyofylen	(1S,9R)-6,10,10-trimethyl-2-methylenbicyklo[7.2.0]undek-5-en	31,81	*		alken
58	6-methyl-3,5-heptedien-2-on		32,20	*		keton
59	4-terpineol	4-methyl-1-(methylethyl)cyklohex-3-en-1-ol	32,63	*		alkohol
60	methyl benzoát		34,27	*		ester
61	butyrolakton		34,90	**		ester
62	alloaromadendren	(1aR,7S,7bS)-1,1,7-trimethyl-4-methyliden-2,3,4a,5,6,7,7a,7b-oktahydro-1aH-cyklopropa[e]azulen	35,26	*		alken
63	mentol	2-Isopropyl-5-methylcyklohexanol	35,55	*		alkohol
64	pulegon	3-Methyl-6-isopropylidenecyklohexanon	35,73	*		keton
65	safranal	2,3-Dihydro-2,2,6-trimethylbenzaldehyd	35,84	*		aldehyd
66	acetophenon	methyl fenyl keton	36,51	*		keton

67	melonol	2,6-dimethylhept-6-en-1-ol	36,96	*		alkohol
68	α -humulen	(1E,4E,8E)-2,6,6,9-tetramethyl-1,4,8-cykloundekatrien	37,12	****	[9,10,12]	alken
69	β -cis-famesene	(6Z)-7,11-Dimethyl-3-methylen-1,6,10-dodecatrien	37,53	*		alken
70	levandulový lakton	5-methyl-5-vinyl-dihydro-furan-2-on	37,85	***		ester
71	carveol	2-methyl-5-prop-1-en-2-ylcyklohex-2-en-1-ol	39,16	*		alkohol
72	oxoisoforon	2,6,6-trimethylcyklohex-2-en-1,4-dion	39,32	*		keton
73	methyl geranát	methyl (2E)-3,7-dimethylokta-2,6-dienoát	39,61	****	[9,12]	ester
74	piperiton	6-Isopropyl-3-methylcyklohex-2-enon	41,21	**		keton
75	cis-geranyl acetát	[(2E)-3,7-dimethylokta-2,6-dienyl] acetát	41,62	****	[9,10]	ester
76	citral	(2E)-3,7-dimethylokta-2,6-dienal	41,93	****	[9,10,12]	aldehyd
77	γ -kadinen	(1S,4aR,8aR)-7-methyl-4-methyliden-1-(propan-2-yl)-1,2,3,4,4a,5,6,8a-oktahydronaphthalen	42,91	*		alken
78	α -acorenol	2-[(1R,4R,5S)-1,8-dimethylspiro[4.5]dec-8-en-4-yl]propan-2-ol	43,11	*		alkohol
79	trans-linalool 3,7-oxid	trans-2-Methyl-2-vinyl-5-(1-hydroxy-1-methylethyl)tetrahydrofuran	43,75	**		epoxid
80	betula	Methyl salicylát	44,20	**		ester
81	cuminaldehyd	4-propan-2-ylbenzaldehyd	44,42	*		aldehyd
82	geraniol	(2E)-3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-ol	45,70	****	[9,10,12]	alkohol
83	2,4-dimethylbenzaldehyd		46,02	*		aldehyd
84	trans-calamenene	(1S,4R)-1,6-dimethyl-4-propan-2-yl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen	46,81	*		alken
85	linalool isobutyrát	3,7-dimethylokta-1,6-dien-3-yl 2-methylpropanoát	47,74	*		ester
86	hexanová kyselina		48,58	*		karboxylová k.
87	β -fenylethanol		50,70	**		alkohol
88	trans- β -ionon	(E)-4-(2,6,6-trimethylcyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on	51,56	*		keton
89	epoxy-linalooloxid	4-(3,3-dimethyloxiran-2-yl)-2-(oxiran-2-yl)butan-2-ol	51,98	**		epoxid

90	karyofylen oxid	4,11,11-Trimethyl-8-methylene-5-oxatricyklo(8.2.0.0(4,6))dodekan	53,04	****	[9,10]	ether
91	lemonen	bifenyl	53,55	*		
92	β -ionon epoxid	(E)-4-(1,5,5-trimethyl-7-oxabicyclo[4.1.0]heptan-6-yl)but-3-en-2-on	53,66	**		epoxid
93	fenol		54,70	**		fenol
94	ethyl linalool	(6E)-3,7-dimethylnona-1,6-dien-3-ol	54,95	*		ether
95	humulen epoxid II	(4Z,8Z)-4,7,7,11-tetramethyl-12-oxabicyklo[9.1.0]dodeka-4,8-dien	55,23	**		ether
96	m-cresole	3-methylfenol	57,42	*		fenol
97	p-cresol	4-hydroxytoluen	57,70	*		fenol
98	spathulenol	1,1,7-trimethyl-4-methyliden-1a,2,3,4a,5,6,7a,7b-octahydrocyclopropa[h]azulen-7-ol	58,42	*		alkohol
99	eugenol	2-methoxy-4-prop-2-enylphenol	60,13	*		alkohol
100	tymol	2-Isopropyl-5-methylfenol	60,81	*		fenol
101	2-methyl-2-pentenal	methyl 3,3-dimethylbicyklo[2.2.1]heptan-5-karboxylát	62,69	*		aldehyd
102	dihydroactinidiolid	4,4,7a-trimethyl-6,7-dihydro-5H-1-benzofuran-2-on	65,41	**		ester
103	hexylcinnamal	2-(fenylmethylen)oktanal	65,96	***		aldehyd
104	methylcamphenoát		69,17	*		ester
105	benzyl cinnamát	Benzylester kyseliny skořicové	75,01	*		ester
106	benzyl salicylát	2-Hydroxybenzoová kyselina, fenylmethyl ester	79,13	**		ester

Legenda: *R_r* – retenční čas, *P* – pravděpodobnost shody s knihovnou spekter (* 0–49,9 %, ** 50–89,9 %, *** 90–100 %, **** látka identifikovaná v jiné publikaci), tučně jsou zvýrazněny potenciální alergenní sloučeniny.

4.2 Měsíček lékařský

V měsíčku lékařském bylo identifikováno 104 vonných látek. Největšího zastoupení dosáhly alkeny 29 % (30). Druhou nejzastoupenější skupinou byly alkoholy 19 % (20). Nejméně bylo zachyceno epoxidů (2), alkanů (3) a fenolů (3). Ve vzorku se nacházela i sloučenina s typickou vůní po vařené zelenině dimethyl sulfoxid. V měsíčku bylo dále identifikováno sedm potenciálně alergenních složek. Z celkového aromatického profilu bylo 23 (22 %) sloučenin již zaznamenáno v citovaných publikacích. U měsíčku je popisována častá silná variabilita AAL vzhledem k vnějším klimatickým podmínkám rostliny a jejímu vegetačnímu stádiu. Ve vzorku byly identifikovány i látky důležité pro praktickou výrobu aromat α -kadinen, α -kadinol, limonen, 1,8-cineol/eukalyptol.

Přehled identifikovaných sloučenin je uveden v tabulce č. 13. Grafy č. 1 a č. 2 popisují kompletní zastoupení jednotlivých skupin sloučenin. V příloze 2 je chromatogram analýzy vzorku měsíčku.

Tab. 13 Aromaticky aktivní látky identifikované v měsíčku lékařském.

Měsíček lékařský						
Č.	Látka	Systematický název	R _T [min]	P	Publikace	Skupina
1	α -fenchon	7,7-dimethyl-3-methylidenebicyklo[2.2.1]heptan	6,37	*		alkan
2	β -terpinen	4-methyliden-1-propan-2-ylcyklohexen	6,41	*		alken
3	α -myrcen	2-methyl-6-methylidenokta-1,7-dien	6,87	*		alken
4	α -pinen	2,6,6-trimethyl[3.1.1]hept-2-en	6,89	****	[25,26,28]	alken
5	tujon	(1S,4R,5R)-4-methyl-1-propan-2-ylbicyklo[3.1.0]hexan-3-on	7,06	*		keton
6	ethylbutyrát		7,64	*		ester
7	fenylethanal		7,66	*		aldehyd
8	kamfen	2,2-dimethyl-3-methylenbicyklo[2.2.1]heptan	8,27	****	[28]	alkan
9	dodekan		9,04	*		alkan
10	hexanal		9,18	****	[26]	aldehyd
11	pentanal		9,18	*		aldehyd
12	β -pinen	Bicyklo(3.1.1)heptan, 6,6-dimethyl-2-methylen-, (1S)-	9,82	*		alken
13	sabinen	4-methyliden-1-propan-2-ylbicyklo[3.1.0]hexan	10,42	****	[28]	alken
14	2,4(10)-tujadien/dehydrosabinen	4-methyliden-1-propan-2-ylbicyklo[3.1.0]hex-2-en	10,94	*		alken
15	hepta-3-on		11,88	**		keton
16	β -myrcen	7-methyl-3-methylenokta-1,6-dien	12,25	*		alken
17	heptan-2-on		13,09	**		keton
18	limonen	1-methyl-4-(1-methylethenyl)cyklohexen	13,61	****	[26,28]	alken
19	eukalyptol	1,3,3-trimethyl-2-oxabicyklo(2.2.2)oktan	13,90	****	[26,28]	ether
20	2-methylbutan-1-ol		14,11	*		alkohol

21	kumen	Isopropylbenzen	14,88	*		alken
22	trans- β -ocimen	(3E)-3,7-dimethylokta-1,3,6-trien	15,28	****	[26,28]	alken
23	γ -terpinen	4-Isopropyl-1-methyl-1,4-cyklohexadien	15,69	*		alken
24	amyl alcohol	pentanol	15,98	*		alkohol
25	m-cymen	1-Methyl-3-(1-methylethyl)benzen	17,13	*		alken
26	n-octanal		17,68	**		aldehyd
27	6-methyl-5-heptene-2-on		19,82	**		keton
28	hexanol		20,42	*		alkohol
29	trans-verbenyl laureát	(4,6,6-trimethyl-2-bicyclo[3.1.1]hept-3-enyl) dodecanoát	20,70	*		ester
30	neo-allo-ocimen	(4E,6Z)-2,6-Dimethyl-2,4,6-oktatrien	21,31	****	[28]	alken
31	E-3-hexenol		21,79	*		alkohol
32	nonanal		22,18	**		aldehyd
33	α -isoforon	3, 5, 5-Trimethyl-2-cyclohexen-1-on	22,56	**		keton
34	o-thymol	5-Isopropyl-2-methylphenol	23,09	*		fenol
35	tujon	(1S,4R)-1-Isopropyl-4-methylbicyklo[3.1.0]hexan-3-on	23,26	*		keton
36	cis-linalool oxid	2-Methyl-2-vinyl-5-(2-hydroxy-2-propyl)tetrahydrofuran	24,12	*		epoxid
37	α -cubeben	1H-Cyklopenta[1,3]cyklopropa[1,2]benzen, 3a,3b,4,5,6,7-hexahydro-3,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, (3aS,3bR,4S,7R,7aR)-	24,61	****	[26]	alken
38	octová kyselina		25,33	*		karboxylová k.
39	α -copaen	(1R,2S,6S,7S,8S)-(-)-8-Isopropyl-1,3-dimethyltricyklo[4.4.0.02,7]dec-3-en	26,05	****	[27]	alken
40	2-ethylhexanol		26,22	*		alkohol
41	n-decanal		26,66	*		aldehyd
42	isovanilin	3-hydroxy-4-methoxybenzaldehyd	27,08	*		aldehyd

43	α -gurjunen	(1aR,4R,4aR,7bS)-1,1,4,7-tetramethyl-1a,2,3,4,4a,5,6,7b-oktahydrocylopropa[e]azulen	27,82	*		alken
44	benzaldehyde		28,08	*		aldehyd
45	bergamol	3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-yl acetát	29,64	*		ester
46	dimethyl sulfoxid DMS		30,68	**		S
47	bicykloseskvifellandren	1-Isopropyl-4-methyl-7-methylen-1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydronaphthalen	31,38	****	[26]	alken
48	2-methylpropanová kyselina		31,51	*		karboxylová k.
49	β -karyofylen	(1S,9R)-6,10,10-trimethyl-2-methylenbicyklo[7.2.0]undek-5-en	31,73	*		alken
50	4-terpineol	4-methyl-1-(methylethyl)cyklohex-3-en-1-ol	32,57	*		alkohol
51	β -copaen	Tricyklo(4.4.0.02,7)dekan, 1-methyl-3-methylen-8-(1-methylethyl)-, (1R,2S,6S,7S,8S)-	33,20	*		alken
52	γ -pentalakton	4,5-Dihydro-5-methyl-2(3H)-furanon	33,42	**		ester
53	β -cylocitral	2,6,6-trimethylcyklohexen-1-carbaldehyd	33,81	**		aldehyd
54	alloaromadendren	(1aR,7S,7bS)-1,1,7-trimethyl-4-methyliden-2,3,4a,5,6,7,7a,7b-oktahydro-1aH-cyklopropa[e]azulen	35,17	*		alken
55	mentol	2-Isopropyl-5-methylcyklohexanol	35,50	*		alkohol
56	safranal	2,3-Dihydro-2,2,6-trimethylbenzaldehyd	35,78	**		aldehyd
57	máslná kyselina	butanová kyselina	36,15	*		karboxylová k.
58	δ -cadinen	(1S,8aR)-4,7-dimethyl-1-propan-2-yl-1,2,3,5,6,8a-hexahydronaphthalen	36,50	****	[25-27]	alken
59	7-epi-cis-seskvisabinene hydrát	(1S,4R)-4-methyl-1-(6-methylhept-5-en-2-yl)bicyklo[3.1.0]hexan-4-ol	36,71	*		alkohol
60	α -humulen	(1E,4E,8E)-2,6,6,9-tetramethyl-1,4,8-cykloundekatrien	37,08	****	[25-27]	alken
61	levandulový lakton	5-methyl-5-vinyl-dihydro-furan-2-on	37,80	*		ester
62	verbenol	4,6,6-Trimethylbicyklo(3.1.1)hept-3-en-2-ol	38,33	*		alkohol
63	γ -muurolen	(1S,4aS,8aR)-7-methyl-4-methyliden-1-propan-2-yl-2,3,4a,5,6,8a-hexahydro-1H-naphthalen	38,57	****	[25,27]	alken

64	oxoisoforon	2,6,6-Trimethylcyklohex-2-en-1,4-dion	39,30	***		keton
65	D-germacren	(1Z,6Z)-1-methyl-5-methyliden-8-propan-2-ylcyklodeka-1,6-dien	39,79	*		alken
66	γ -hexalakton	5-ethyloxolan-2-on	39,95	**		alken
67	β -Selinen / β -eudesmen	(3R,4aS,8aR)-8a-methyl-5-methyliden-3-prop-1-en-2-yl-1,2,3,4,4a,6,7,8-octahydronaphthalen	40,37	*		alken
68	α -muurolen	(1S,4aS,8aR)-4,7-dimethyl-1-propan-2-yl-1,2,4a,5,6,8a-hexahydronaphthalen	40,97	****	[25,27]	alken
69	piperiton	6-Isopropyl-3-methylcyklohex-2-enon	41,19	*		keton
70	γ -kadinen	1S,4aR,8aR)-4,7-dimethyl-1-(propan-2-yl)-1,2,4a,5,6,8a-hexahydronaphthalen	42,89	****	[25,27]	alken
71	valerová kyselina	pentanová kyselina	43,32	**		karboxylová k.
72	α -ylangen	tricyklo[4.4.0.02,7]dek-3-en, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, (1S,2R,6R,7R,8S)-	44,13	****	[26]	alken
73	α -kadinen	(1S,4aR,8aR)-4,7-dimethyl-1-(propan-2-yl)-1,2,4a,5,6,8a-hexahydronaphthalen	44,69	****	[27]	alken
74	α -santalol	(Z)-5-(2,3-dimethyl-4,5,6,7-tetrahydro-1H-tricyclo[2.2.1.0 ^{2,6}]heptan-3-yl)-2-methylpent-2-en-1-ol	45,23	*		alkohol
75	α -ionon	(E)-4-(2,5,6,6-tetramethylcyklohex-2-en-1-yl)but-3-en-2-on	47,73	****	[27]	keton
76	hexanová kyselina		48,45	*		karboxylová k.
77	methyl isopulegon	5-methyl-2-prop-1-en-2-ylcyclohexan-1-on	50,18	*		keton
78	α -calacorene	(1S)-4,7-dimethyl-1-propan-2-yl-1,2-dihydronaphthalen	50,52	**		ether
79	fenylethanol		50,69	**		alkohol
80	karyofylen oxid	4,11,11-Trimethyl-8-methylene-5-oxatricyklo(8.2.0.0(4,6))dodekan	51,09	****	[27,28]	ether
81	trans- β -ionon	(E)-4-(2,6,6-trimethylcyclohexen-1-yl)but-3-en-2-on	51,54	*		keton
82	humulen epoxid II	(4Z,8Z)-4,7,7,11-tetramethyl-12-oxabicyklo[9.1.0]dodeka-4,8-dien	52,09	*		ether
83	β -calacoren	7-methyl-4-methyliden-1-propan-2-yl-2,3-dihydro-1H-naphthalen	52,29	****	[25]	alken

84	kubebol	(1R,4S,5R,6R,7S,10R)-7-isopropyl-4,10-dimethyl-tricyklo[4.4.0.0(1,5)]dekan-4-ol	53,36	*		alkohol
85	β -ionon epoxid	(E)-4-(1,5,5-trimethyl-7-oxabicyklo[4.1.0]heptan-6-yl)but-3-en-2-on	53,64	**		
86	fenol		54,68	**		fenol
87	isopropyl myristát	propan-2-yl tetradekanoát	55,33	**		ester
88	β -santanol acetát	[(E)-2-methyl-5-(3-methyl-2-methyliden-3-bicyklo[2.2.1]heptanyl)pent-2-enyl] acetát	55,42	*		ester
89	germacrene D-4-ol	(2Z,7Z)-1,7-dimethyl-4-propan-2-ylcyklodeka-2,7-dien-1-ol	55,78	*		alkohol
90	oktanová kyselina		56,85	*		karboxylová k.
91	amylcinnamylalkohol	(2Z)-2-benzylideneheptan-1-ol	58,18	*		alkohol
92	spathulenol	decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylen-1h-cykloprop[e]azulen-7-ol	58,43	****	[28]	alkohol
93	geranyl iso-valerát	[(2E)-3,7-dimethyl-okta-2,6-dienyl] 3-methylbutanoát	58,92	*		ester
94	T-kadinol	(1S,4S,4aR,8aR)-1,6-dimethyl-4-propan-2-yl-3,4,4a,7,8,8a-hexahydro-2H-naphthalen-1-ol	59,99	*		alkohol
95	Karvakrol / isotymol	2-methyl-5-propan-2-ylfenol	60,80	*		
96	δ -kadinol		60,93	*		alkohol
97	β -eudesmol	2-[(2R,4aR,8aS)-4a-methyl-8-methylidendekahydronaphthalen-2-yl]propan-2-ol	61,84	*		alkohol
98	α -kadinol	(1S,4S)-1,6-dimethyl-4-propan-2-yl-3,4,4a,7,8,8a-hexahydro-2H-naphthalen-1-ol	61,94	****	[25,26]	alkohol
99	karyofylladienol II	11,11-dimethyl-4,8-dimethylidenbicyklo[7.2.0]undekan-5-ol	63,98	*		alkohol
100	dihydroaktinidiolid	4,4,7a-trimethyl-6,7-dihydro-5H-1-benzofuran-2-on	65,39	**		ester
101	hexylcinnamal	2-(fenylmethylen)oktanal	65,95	***		aldehyd
102	benzylbenzoát		73,60	**		ester
103	benzyl salicylát	2-Hydroxybenzoová kyselina, fenylmethyl ester	79,11	**		ester

104	benzyl hydrocinnamát	benzyl 3-phenylpropanoát	80,98	*		ester
-----	----------------------	--------------------------	-------	---	--	-------

Legenda: R_r – retenční čas, P – pravděpodobnost shody s knihovnou spekter (0–49,9 %, ** 50–89,9 %, *** 90–100 %, **** látka identifikovaná v jiné publikaci), S – sloučeniny obsahující síru, tučně jsou zvýrazněny potenciální alergenní sloučeniny.*

4.3 Šalvěj muškátová

Ve vzorku se podařilo identifikovat 82 AAL. Šalvěj obsahovala nejmenší počet potenciálních vonných alergenních složek – 5. Dvacet čtyři sloučenin již bylo popsáno při jiných studiích aromatického profilu šalvěže, což je přibližně 29 % z celkového množství a zároveň největší shoda z celého souboru vzorků s vědeckými publikacemi. Typickou těžkou látku šalvěže sklareol se identifikovat nepodařilo. Hlavními sloučeninami byliny byly alkeny 36 % (30), alkoholy 21 % (17) a estery 19 % (16). K podobnému závěru dospěla i studie Farkaše a kol. (2005), která uvádí jako hlavní složky estery s alkoholy. S R_T 68,6 min. byl zaznamenán indol jako jediná látka obsahující dusík. Nejméně zastoupeny byly ethery 2 % (2). Alkany, aldehydy, epoxidy a kyseliny byly zastoupeny ve stejném množství a to 4 % (3).

Přehled identifikovaných sloučenin je uveden v tabulce č. 14. Grafy č. 1 a č. 2 popisují kompletní zastoupení jednotlivých skupin sloučenin. V příloze 3 je chromatogram analýzy vzorku šalvěže.

Tab. 14 Aromaticky aktivní látky identifikované v šalvěži muškátové.

Šalvěj muškátová						
Č.	Látka	Systematický název	R _T [min]	P	Publikace	Skupina
1	α -pinen	2,6,6-trimethyl[3.1.1]hept-2-en	6,95	****	[36,42]	alken
2	sabinen hydrát	(1R,2S,5S)-5-Isopropyl-2-methylbicyclo[3.1.0]hexan-2-ol	7,21	*		alkohol
3	kamfen	2,2-dimethyl-3-methylenbicyclo[2.2.1]heptan	8,34	****	[36,42]	alkan
4	3-karen	3,7,7-Trimethylbicyclo[4.1.0]hept-3-en	8,67	*		alken
5	dodekan		8,87	*		alkan
6	β -pinen	Bicyklo(3.1.1)heptan, 6,6-dimethyl-2-methylen-, (1S)-	9,90	****	[36,42]	alken
7	butan-1-ol		11,57	*		alkohol
8	2-nonen-1-ol, 2-methyl		11,79	*		alkohol
9	3-ethyl-5-(2-ethylbutyl)oktadekan		11,85	*		alken
10	geranyl isovalerát	(E)-3,7-Dimethyl-2,6-oktadienyl 3-methylbutanoát	11,95	*		ester
11	α -myrcen	2-methyl-6-methylidenokta-1,7-dien	12,09	****	[36,40]	alken
12	β -myrcen	7-methyl-3-methylenokta-1,6-dien	12,52	****	[36,40,42]	alken
13	limonen	1-methyl-4-(1-methylethenyl)cyklohexen	13,81	****	[36,40,42]	alken
14	β -tujen	1-Isopropyl-4-methylbicyclo[3.1.0]hex-2-en	14,18	*		alken
15	β -felandren	3-methyliden-6-propan-2-ylcyklohexen	14,32	*		alken
16	pseudolimonen	1-Methylene-4-(1-methylvinyl)cyclohexan	14,52	*		alken
17	trans- β -ocimen	(3E)-3,7-dimethylokta-1,3,6-trien	15,49	****	[36,40,42]	alken
18	terpinolen	4-Isopropylidene-1-methylcyklohexen	17,45	****	[40]	alken
19	γ -terpinen	4-Isopropyl-1-methyl-1,4-cyklohexadien	17,80	*		alken
20	amyl vinyl keton	okt-1-en-3-on	18,31	**		keton
21	6-methyl-5-hepten-2-on		19,88	**		keton

22	hexanol		20,47	*		alkohol
23	neo-allo-ocimen	(4E,6Z)-2,6-Dimethyl-2,4,6-oktatrien	21,45	*		alken
24	trans-3-hexenol		21,85	*		alkohol
25	nonanal		22,25	*		aldehyd
26	L-borneol	(1R,3R,4S)-4,7,7-trimethylbicyklo[2.2.1]heptan-3-ol	22,69	****	[42]	alkohol
27	cis-myroside	(Z)-2,2-Dimethyl-3-(3-methylpenta-2,4-dien-1-yl)oxirane	22,98	**		ether
28	cis-linalool oxid	2-Methyl-2-vinyl-5-(2-hydroxy-2-propyl)tetrahydrofuran	24,22	****	[36]	epoxid
29	octová kyselina		24,87	**		karboxylová k.
30	trans-linalool-oxid	trans-2-Methyl-2-vinyl-5-(1-hydroxy-1-methylethyl)tetrahydrofuran	25,42	****	[36]	epoxid
31	α -copaen	(1R,2S,6S,7S,8S)-(-)-8-Isopropyl-1,3-dimethyltricyklo[4.4.0.02,7]dec-3-en	26,49	****	[42]	alken
32	β -bourbonene	(1S,3aS,3bR,6aS,6bR)-1-Isopropyl-3a-methyl-6-methylenedekahydrocyklobuta[1,2:3,4]di[5]annulen	27,68	****	[42]	alken
33	benzaldehyd		28,15	*		aldehyd
34	β -copaen	Tricyklo(4.4.0.02,7)dekan, 1-methyl-3-methylen-8-(1-methylethyl)-, (1R,2S,6S,7S,8S)-	28,68	*		alken
35	D-germacren	(1Z,6Z)-1-methyl-5-methyliden-8-propan-2-ylcyklodeka-1,6-dien	28,88	****	[36,42]	alken
37	bergamol	3,7-dimethylokta-1,6-dien-3-yl acetát	30,14	*		ester
38	3-methylbutanová kyselina		31,13	*		karboxylová k.
39	L-bornyl acetát	1,7,7-Trimethylbicyklo(2.2.1)heptan-2-ol acetát	31,76	*		ester
40	linalool formát	(1,5-dimethyl-1-vinyl-hex-4-enyl) formát	32,20	**		ester
41	β -karyofylen	(1S,9R)-6,10,10-trimethyl-2-methylenbicyklo[7.2.0]undek-5-en	32,58	****	[36,40]	alken
42	lyratyl acetát	(2E)-4-ethenyl-2,5-dimethylhexa-2,5-dien-1-yl acetát	32,84	*		ester
43	4-terpineol	4-methyl-1-(methylethyl)cyklohex-3-en-1-ol	33,01	****	[36]	alkohol
44	verbenol	4,6,6-Trimethylbicyklo(3.1.1)hept-3-en-2-ol	34,80	*		alkohol
45	kadina-3,5-dien	3,8-dimethyl-5-(propan-2-yl)-1,2,3,7,8,8a-hexahydronaphthalen	35,21	**		alken

46	citronellyl n-butyrát	3,7-dimethyl-6-okten-1-yl butyrát	35,74	*		ester
47	perillyl acetát	(4-Isopropenyl-1-cyclohexen-1-yl)methyl acetát	35,89	*		ester
48	δ -kadinen	1S,8aR)-1-Isopropyl-4,7-dimethyl-1,2,3,5,6,8a-hexahydronaphthalen	36,76	****	[40,42]	alken
49	ε-muurolen	4-Isopropyl-1,6-dimethylenedecahydronaphthalene	36,96	*		alken
50	α -humulen	(1E,4E,8E)-2,6,6,9-tetramethyl-1,4,8-cykloundekatrien	37,35	****	[40,42]	alken
51	cis-muurolo-4-(15),5-dien		37,52	*		alken
52	levandulový lakton	5-methyl-5-vinyl-dihydro-furan-2-on	37,97	***		ester
53	neryl formát	(Z)-3,7-Dimethyl-2,6-octadienyl formate	38,18	*		ester
54	γ -muurolen	(1S,4aS,8aR)-1-isopropyl-7-methyl-4-methylen-1,2,3,4,4a,5,6,8a-oktahydronaphthalen	38,77	*		alken
55	silvan	2-methylfuran	39,02	*		ether
56	2-methylhexanová kyselina		39,25	*		karboxylová k.
57	α -terpineol acetát	[1-methyl-1-(4-methylcyklohex-3-en-1-yl)ethyl] acetát	39,57	**		ester
58	neryl acetát	(Z)-3,7-Dimethylokta-2,6-dien-1-yl acetát	41,74	****	[36,42]	ester
59	trans-linalool 3,7-oxid	trans-2-Methyl-2-vinyl-5-(1-hydroxy-1-methylethyl)tetrahydrofuran	42,36	**		epoxid
60	geranyl aceton	6,10-Dimethylundeka-5,9-dien-2-on	43,54	*		keton
61	betula	methyl salicylát	44,23	**		ester
62	α -kadinen	(1S,4aR,8aR)-4,7-dimethyl-1-(propan-2-yl)- 1,2,4a,5,6,8a-hexahydronaphthalen	44,80	****	[43]	alken
63	geraniol	3,7-Dimethyl-2,6-oktadien-1-ol	45,73	****	[36]	alkohol
64	1,3,8-p-menthatriene	1-methyl-4-(prop-1-en-2-yl)cyklohexa-1,3-dien	47,45	*		alken
65	2,2,4-trimethylpentadiol-1,3-diisobutyát		48,91	**		ester
66	benzylalkohol		49,33	*		alkohol
67	α -kalakoren	4,7-dimetyl-1-propan-2-yl-1,2-dihydronaphthalen	50,55	**		alken
68	β -fenylethyl alkohol		50,72	**		alkohol

69	α-ionol	4-(2,6,6-Trimethyl-2-cyklohexenyl)-3-buten-2-ol	51,17	*		alkohol
70	β-ionon	4-(2,6,6-Trimethylcyklohex-1-en-1-yl)but-3-en-2-on	51,57	*		keton
71	trans-piperitol	(1R,6R)-6-Isopropyl-3-methyl-cyklohex-2-en-1-ol	52,97	*		alkohol
72	4-(4-methylphenyl)pentanal	4-(4-methylphenyl)pentanal	53,12	**		aldehyd
73	isopropyl myristát / bisomel	propan-2-yl tetradekanoát	55,36	***		ester
74	3,7-dimethyl-1,5-oktadien-3,7-diol		55,64	**		alkohol
75	α-korokalen	1,6-Dimethyl-4-isopropyl-7,8-dihydronaphthalen	56,25	**		alken
76	spathulenol	decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylen-1h-cykloprop[e]azulen-7-ol	58,43	****	[40,42]	alkohol
77	α-eudesmol	2-[(2R,4aR,8aR)-4a,8-dimethyl-1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydronaphthalen-2-yl]propan-2-ol	61,60	****	[36,40]	alkohol
78	cadalen	1,6-Dimethyl-4-isopropylnaphthalen	61,71	**		alken
79	β-eudesmol	2-[(2R,4aR,8aS)-4a-methyl-8-methylidendekahydronaphthalen-2-yl]propan-2-ol	61,86	****	[40,42]	alkohol
80	indol	Benzo[b]pyrrol	68,60	**		N
81	benzyl cinnamát	Benzylester kyseliny skořicové	75,02	*		ester
82	benzyl salicylát	2-Hydroxybenzoová kyselina, fenylmethyl ester	79,13	**		ester

Legenda: R_r – retenční čas, P – pravděpodobnost shody s knihovnou spekter (0–49,9 %, ** 50–89,9 %, *** 90–100 %, **** látka identifikovaná v jiné publikaci), N – sloučeniny obsahující dusík, tučně jsou zvýrazněny potenciální alergenní sloučeniny.*

4.4 Ostropestřec mariánský

Z celého souboru bylin bylo v ostropestřci identifikováno nejméně AAL. Z celkových 73 látek byly literárně potvrzeny jen čtyři. Ty byly identifikovány při studii Mhadiho a kol. (2016) Další studie složení EO ostropestřce, se kterými by bylo možno výsledky porovnat, zatím nebyly publikovány. Ostropestřec obsahoval šest potenciálních vonných alergenů. Nejvíce zastoupené sloučeniny byly alkeny 18 % (13) a alkoholy 18 % (13), ketony 15 % (11). Nejméně bylo zaznamenáno fenolů 1 % (1). Ostropestřec jako jediná bylina obsahoval sloučeniny se sírou 3 % (2) a dusíkem (5) 7 % (viz níže).

Síra:

- dimethyl sulfoxid
- prop-1-enyl dithiopropanonát

Dusík:

- methylpyrazin
- 2,5-dimethylpyrazin
- 3,5-dimethylpyrazin
- γ -kollidin (2,4,6-trimethylpyridin)
- 2,3,5-trimethylpyrazin

Celkový přehled identifikovaných sloučenin je uveden v tabulce č. 15. Grafy č. 1 a č. 2 popisují kompletní zastoupení jednotlivých skupin sloučenin. V příloze 4 je chromatogram analýzy vzorku ostropestřce.

Tab. 15 Aromaticky aktivní látky identifikované v ostropestřci mariánském.

Ostropestřec mariánský						
Č.	Látka	Systematický název	R _T [min]	P	Publikace	Skupina
1	α -pinen	2,6,6-trimethyl[3.1.1]hept-2-en	6,90	****	[60]	alken
2	kamfen	2,2-dimethyl-3-methylenbicyklo[2.2.1]heptan	8,30	****	[60]	alken
3	n-undekan		9,06	*		alkan
4	hexanal		9,20	*		aldehyd
5	linalool	3,7-Dimethylokta-1,6-dien-3-ol	10,01	*		alkohol
6	4,4-dimethyl-2-cyklohexen-1-ol		10,06	*		alkohol
7	hexa-hydro-farnesol	3,7,11-trimethyldodekan-1-ol	10,25	*		alkohol
8	β -tujen	1-Isopropyl-4-methylbicyklo[3.1.0]hex-2-en	10,45	*		alken
9	p- α -dimethylbenzyl alkohol		10,54	*		alkohol
10	2-butylfuran		11,15	*		ether
11	3-heptanon		11,94	*		keton
12	β -myrcen	7-methyl-3-methylenokta-1,6-dien	12,28	**		alken
13	m-diethylbenzen		12,74	*		alken
14	α -terpinen	1-isopropyl-4-methyl-1,3-cyklohexadien	12,83	*		alken
15	heptan-2-on		13,10	*		keton
16	dodekan		13,35	*		alkan
17	limonen	1-methyl-4-(1-methylethenyl)cyklohexen	13,63	****	[60]	alken
18	eukalyptol	1,3,3-trimethyl-2-oxabicyklo(2.2.2)oktan	13,93	**		ether
19	kumen	isopropylbenzen	14,85	*		alken
20	n-pentadekan		15,00	*		alken
21	2-amylfuran		15,20	**		ether
22	3-oktanon		16,18	*		keton
23	methylpyrazin		16,72	**		N
24	o-cymen	2-isopropyl-1-methylbenzen	16,82	*		alken

25	butan-2-ol		18,96	*		alkohol
26	isopropanol		18,99	**		alkohol
27	2,5-dimethylpyrazin		19,11	**		N
28	3,5-dimethylpyrazin		19,34	**		N
29	3-ethyl-5-(2-ethylbutyl)oktadekan		20,02	*		alken
30	hexanol		20,43	**		alkohol
31	diacetonalkohol		20,92	*		keton
32	γ -kollidin	2,4,6-Trimethylpyridin	20,97	*		N
33	myrtenylmethyl ether	2-(methoxymethyl)-6,6-dimethylbicyklo[3.1.1]hept-2-en	21,44	*		ether
34	amyl vinyl karbinol acetát	1-Okten-3-yl acetát	21,54	*		ester
35	tetradekan		21,93	*		alken
36	nonanal		22,20	*		aldehyd
37	2,3,5-trimethylpyrazin		22,55	*		N
38	3-okten-2-on		22,81	*		keton
39	tetrahydro linalool	3,7-dimethyloctan-3-ol	23,75	*		alkohol
40	ethyloktanoát		23,85	*		ester
41	cis-linalool oxid	2-Methyl-2-vinyl-5-(2-hydroxy-2-propyl)tetrahydrofuran	24,13	*		epoxid
42	okt-1-en-3-ol		24,57	*		alkohol
43	I-menton	(2S,5S)-2-isopropyl-5-methylcyklohexanon	25,04	*		keton
44	octová kyselina		25,42	*		karboxylová k.
45	prop-1-enyl dithiopropanonát		26,87	*		S
46	trans-pinokamfon	2,6,6-Trimethylbicyklo[3.1.1]heptan-3-on	27,41	*		keton
47	3,5-oktadien-2-on		27,83	**		keton
48	benzaldehyd		28,14	*		aldehyd
49	linalool formát	(1,5-dimethyl-1-vinyl-hex-4-enyl) formát	29,66	*		ester
50	dimethyl sulfoxid	methylsulfinylmethan	30,80	**		S
51	2,3-butandiol		31,15	*		alkohol

52	(Z,Z)- α -farnesen	2,6,10-Trimethyldodeka-2,6,9,11-tetraen	31,74	*		alken
53	L-mentol	(1R,2S,5R)-5-methyl-2-(propan-2-yl)cyklohexan-1-ol	32,20	*		alkohol
54	4-terpineol	4-methyl-1-(methylethyl)cyklohex-3-en-1-ol	32,60	****	[60]	alkohol
55	γ -pentalakton	4,5-Dihydro-5-methyl-2(3H)-furanon	33,44	*		ester
56	butanová kyselina		36,43	*		karboxylová k.
57	levandulový lakton	5-methyl-5-vinyl-dihydro-furan-2-on	37,83	**		ester
58	isovalerová kyselina		39,19	*		karboxylová k.
59	γ -ethylbutyrolakton	5-Ethyldihydrofuran-2(3H)-on	39,97	**		ester
60	piperiton	6-Isopropyl-3-methylcyklohex-2-enon	41,15	*		keton
61	L-karvon	(R)-2-Methyl-5-(1-methylethenyl)-2-cyklohexen-1-on	41,71	*		keton
62	hexanová kyselina		48,58	*		karboxylová k.
63	benzylalkohol		49,29	*		alkohol
64	2-hydroxy-3-pinanon	2-hydroxy-2,6,6-trimethylbicyclo[3.1.1]heptan-3-on	52,35	**		keton
65	heptanová kyselina		52,98	*		karboxylová k.
66	γ -amylbutyrolakton	5-pentyltetrahydrofuran-2-on	55,16	**		ester
67	oktanová kyselina		56,91	*		karboxylová k.
68	tymol	2-Isopropyl-5-methylfenol	61,70	*		fenol
69	dihydroaktinidiolid	5,6,7,7a-Tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-2(4H)-benzofuranon	65,41	**		ester
70	hexylcinnamal	2-(fenylmethylen)oktanal	65,95	**		aldehyd
71	benzyl cinnamát	Benzylester kyseliny skořicové	74,94	*		ester
72	benzylsalicylát	2-Hydroxybenzoová kyselina, fenylmethyl ester	79,12	**		ester
73	benzyl hydrocinnamát	3-fenylpropionová kyselina, benzyl ester	81,00	**		ester

Legenda: *R_r* – retenční čas, *P* – pravděpodobnost shody s knihovnou spekter (* 0–49,9 %, ** 50–89,9 %, *** 90–100 %, **** látka identifikovaná v jiné publikaci), *N* – sloučeniny obsahující dusík, *S* – sloučeniny obsahující síru, tučně jsou zvýrazněny potenciální alergenní sloučeniny.

4.5 Jestřabina lékařská

V jestřabině bylo identifikováno nejvíce AAL z celé sady vzorků. Z celkových 110 látek patří mezi potenciální alergenní sloučeniny devět z nich. Tato hodnota je rovněž největší ze souboru bylin. Jak již bylo zmíněno, dosud nebyla publikována práce zabývající se obsahem AAL v této rostlině a aromatický profil jestřabiny nebyl zatím zcela popsán, proto chybí potvrzení identifikovaných vonných látek s jinými publikacemi. Bharti a kol. (2012) poukazují, že by se v bylinách stimulujících laktaci mohly vyskytovat určité AAL. Z celé řady látek, které studie uvádí, byly nalezeny jen dvě - β -myrcen, γ -kadinen. 22 % (24) sloučenin obsahovalo esterovou vazbu, 20 % (22) patřilo mezi ketony. Nejméně sloučenin bylo ze skupin alkanů 1 % (1), etherů 3 % (3), fenolů 3 % (3). V celém spektru nebyla zaznamenána sloučenina obsahující síru nebo dusík.

Přehled identifikovaných sloučenin je uveden v tabulce č. 16. Grafy č. 1 a č. 2 popisují kompletní zastoupení jednotlivých skupin sloučenin. V příloze 5 je chromatogram analýzy vzorku jestřabiny.

Tab. 16 Aromaticky aktivní látky identifikované v jeřábce lékařské.

Jeřábce lékařská						
Č.	Látka	Systematický název	R _T [min]	P	Publikace	Skupina
1	2,7-oktadien, 1-butoxy		6,92	*		ether
2	3-ethyl-5-(2-ethylbutyl)oktadekan		7,38	*		alken
3	ethylbutyrát		7,63	**		ester
4	kamfen	2,2-dimethyl-3-methylenbicyklo[2.2.1]heptan	8,28	*		alken
5	dodekan		9,05	*		alkan
6	hexanal		9,20	**		aldehyd
7	geraniol formát	3,7-dimethylokta-2,6-dien-1-yl formát	10,48	**		ester
8	α -ionon	(E)-4-(2,6,6-trimethylcyklohex-2-en-1-yl)but-3-en-2-on	10,53	*		keton
9	ethylpentanoát		11,16	**		ester
10	methyl myrtenát	Methyl 6,6-dimethylbicyklo[3.1.1]hept-2-en-2-karboxylát	11,80	*		ester
11	3-heptanon		11,90	*		keton
12	6-methyl-7-okten-2-on		12,03	*		keton
13	hex-1-en-3-ol		12,18	**		alkohol
14	β -myrcen	7-Methyl-3-methyleneokta-1,6-dien	12,33	****	[52]	alken
15	β -pinen	Bicyklo(3.1.1)heptan, 6,6-dimethyl-2-methylen-, (1S)-	12,83	*		alken
16	β -terpinen	1-Isopropyl-4-methylcyklohexen	12,87	*		alken
17	sabinen hydrát	(1R,2S,5S)-5-Isopropyl-2-methylbicyklo[3.1.0]hexan-2-ol	12,90	*		alkohol
18	heptan-2-on		13,11	**		keton
19	4-methylnonan		13,33	*		alken
20	limonen	1-methyl-4-(1-methylethenyl)cyklohexen	13,64	*		alken
21	senecialdehyd	3-Methylbut-2-enal	13,95	*		aldehyd
22	trans-2-hexenal		14,71	*		aldehyd
23	2-amylfuran		15,19	**		ether
24	trans- β -ocimen	(3E)-3,7-dimethylokta-1,3,6-trien	15,35	*		alken

25	cis-4-hepten-1-al		15,73	*		aldehyd
26	m-cymen	1-Methyl-3-(1-methylethyl)benzen	16,81	*		alken
27	oktan-2-on		17,51	*		keton
28	3-hydroxy-2-butanon		17,63	**		keton
29	oktanal		17,71	*		aldehyd
30	2,2,6-trimethylcyklohexan-1-on		18,79	*		keton
31	cis-2-pentenol		19,09	**		alkohol
32	6-methyl-5-heptene-2-on		19,83	**		keton
33	hexanol		20,42	*		alkohol
34	neo-allo-ocimen	(4E,6Z)-2,6-Dimethyl-2,4,6-oktatrien	21,34	*		alken
35	1-oktenyl-3-acetát		21,54	**		ester
36	cis-3-hexen-1-ol		21,81	*		alkohol
37	α -isoforon	3, 5, 5-Trimethyl-2-cyclohexen-1-on	22,56	**		keton
38	plinol A	1,2-dimethyl-3-prop-1-en-2-ylcyklopentan-1-ol	22,82	*		alkohol
39	o-tymol	5-Isopropyl-2-methylphenol	23,11	*		fenol
40	tujon	(1S,4R)-1-Isopropyl-4-methylbicyklo[3.1.0]hexan-3-on	23,28	*		keton
41	ethyloktanoát		23,87	*		ester
42	α -cyclocitral	2,6,6-Trimethylcyklohex-2-en-1-carbaldehyd	24,00	*		aldehyd
43	linalool oxid	2-Methyl-2-vinyl-5-(2-hydroxy-2-propyl)tetrahydrofuran	24,14	*		epoxid
44	okt-1-en-3-ol		24,57	**		alkohol
45	isomenthon		25,04	*		keton
46	trans-linalool-oxid	trans-2-Methyl-2-vinyl-5-(1-hydroxy-1-methylethyl)tetrahydrofuran	25,35	*		epoxid
47	octová kyselina		25,51	**		karboxylová k.
48	3,5,5-trimethyl-hex-2-en		26,11	*		alken
49	trans-2-trans-4-heptadienal		26,62	*		aldehyd
50	acetyl furan	1-(furan-2-yl)ethanon	27,21	**		keton
51	kamfor	4,7,7-trimethylbicyklo[2.2.1]heptan-3-on	27,36	*		keton

52	3,5-oktadien-2-on		27,82	*		keton
53	benzaldehyd		28,09	**		aldehyd
54	isopinokamfon	2,6,6-Trimethylbicyklo[3.1.1]heptan-3-on	28,90	**		keton
55	linalool	3,7-Dimethylokta-1,6-dien-3-ol	29,25	*		alkohol
56	bergamol	3,7-dimethylokta-1,6-dien-3-yl acetát	29,67	**		ester
57	propionová kyselina		30,03	**		karboxylová k.
58	santalen	6,7-dimethyl-7-(4-methylpent-3-enyl)-2,3,4,5-tetrahydro-1H-tricyklo[2.2.1.0 _{2,6}]heptan	30,28	*		alken
59	trans-3, trans-5-oktadien-2-on		30,67	**		keton
60	2-methylpropanová kyselina		31,44	**		karboxylová k.
61	β -karyofylen	(1S,9R)-6,10,10-trimethyl-2-methylenbicyklo[7.2.0]undek-5-en	31,75	*		alken
62	6-methyl-3,5-heptadien-2-on		32,18	*		keton
63	lavandulyl acetát	5-Methyl-2-(1-methylethenyl)-4-hexen-1-ol acetát	33,03	*		ester
64	γ -pentalakton	4,5-Dihydro-5-methyl-2(3H)-furanon	33,45	**		ester
65	3-methylbenzaldehyd		34,42	*		aldehyd
66	L-mentol	(1R,2S,5R)-5-methyl-2-(propan-2-yl)cyklohexan-1-ol	34,54	*		alkohol
67	isomentol	(1R,2S,5R)-5-methyl-2-(propan-2-yl)cyklohexan-1-ol	34,59	*		alkohol
68	safranal	2,3-Dihydro-2,2,6-trimethylbenzaldehyd	35,80	**		aldehyd
69	α -humulen	(1E,4E,8E)-2,6,6,9-tetramethyl-1,4,8-cykloundekatrien	37,08	*		alken
70	citronelol hydrát	3,7-Dimethyloct-6-en-1-ol;hydrát	37,31	*		alkohol
71	levandulový lakton	5-methyl-5-vinyl-dihydro-furan-2-on	37,81	***		ester
72	lavandulol	(R)-5-Methyl-2-(1-methylethenyl)-4-hexen-1-ol	38,55	*		alkohol
73	3-methylbutanová kyselina		39,04	*		karboxylová k.
74	oxoisoforon	2,6,6-Trimethylcyklohex-2-ene-1,4-dion	39,32	***		keton
75	borneol	(1R,2S,4R)-rel-1,7,7-Trimethylbicyklo[2.2.1]heptan-2-ol	39,81	*		alkohol
76	γ -ethylbutyrolakton	5-Ethyldihydrofuran-2(3H)-on	39,97	**		ester
77	α -methylcinnamaldehyd	2-methyl-3-fenyl-propenal	40,14	*		aldehyd
78	piperiton	6-Isopropyl-3-methylcyklohex-2-enon	41,17	*		keton

79	neryl acetát	(Z)-3,7-Dimethylokta-2,6-dien-1-yl acetát	41,58	*		ester
80	trans-linalool 3,7-oxid	trans-2-Methyl-2-vinyl-5-(1-hydroxy-1-methylethyl)tetrahydrofuran	42,27	**		epoxid
81	γ -kadinen	(1S,4aR,8aR)-7-methyl-4-methyliden-1-(propan-2-yl)-1,2,3,4,4a,5,6,8a-oktahydronaphthalen	42,89	****	[52]	alken
82	geranyl angelát	[(2E)-3,7-dimethylokta-2,6-dienyl] pentanoát	43,34	*		ester
83	α -isomethyl ionon	3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on	47,63	*		keton
84	geranyl aceton	6,10-Dimethylundeka-5,9-dien-2-on	48,12	*		keton
85	hexanová kyselina		48,50	*		karboxylová k.
86	2-fenylethanol		50,69	**		alkohol
87	β -ionon	4-(2,6,6-Trimethyl-1-cyklohexenyl)-3-buten-2-on	51,53	*		keton
88	dekan-1-ol		52,91	*		alkohol
89	karyofylen oxid	4,11,11-Trimethyl-8-methylene-5-oxatricyklo(8.2.0.0(4,6))dodekan	53,02	*		ether
90	β -ionon-5,6-epoxid	(E)-4-(1,2-Epoxy-2,6,6-trimethylcyklohexan-1-yl)-3-buten-2-on	53,64	**		epoxid
91	trans-hexanová kyselina		53,90	**		karboxylová k.
92	γ -nonalakton		55,18	*		ester
93	isopropyl myristát / bisomel	propan-2-yl tetradekanoát	55,34	**		ester
94	2,6-dimethyl 2,6-oktadien		55,63	*		alken
95	oktanová kyselina		56,89	**		karboxylová k.
96	p-cresol	4-hydroxytoluen	57,43	*		fenol
97	T-kadinol	(1S,4S,4aR,8aR)-1,6-dimethyl-4-propan-2-yl-3,4,4a,7,8,8a-hexahydro-2H-naphthalen-1-ol	59,99	*		alkohol
98	ethylhexyl benzoát	Benzoová kyselina, 2-ethylhexyl ester	60,13	**		ester
99	tymol	2-Isopropyl-5-methylfenol	60,79	*		fenol
100	hexyl salicylát		61,32	**		ester
101	α -kadinol	(1S,4R)-1,6-dimethyl-4-propan-2-yl-3,4,4a,7,8,8a-hexahydro-2H-naphthalen-1-ol	61,94	*		alkohol
102	amylcinnamal	2-benzylidenheptanal	62,86	*		aldehyd
103	hedion	Methyl (3-oxo-2-pentylcyklopentyl)acetát	63,66	**		ester

104	dihydroaktinidiolid	5,6,7,7a-Tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-2(4H)-benzofuranon	65,38	**		ester
105	hexylcinnamal	2-(fenylmethylen)oktanal	65,95	***		aldehyd
106	benzylbenzoát	Benzylester kyseliny benzoové	73,60	**		ester
107	benzyl alkohol		74,95	**		ester
108	benzyl salicylát	2-Hydroxybenzoová kyselina, fenylmethyl ester	79,10	**		ester
109	benzyl hydrocinnamát	3-fenylpropionová kyselina, benzyl ester	80,97	**		ester
110	benzyl cinnamát	Benzylester kyseliny skořicové	85,61	*		ester

Legenda: R_T – retenční čas, P – pravděpodobnost shody s knihovnou spekter (0–49,9 %, ** 50–89,9 %, *** 90–100 %, **** látka identifikovaná v jiné publikaci), tučně jsou zvýrazněny potenciální alergenní sloučeniny.*

5 ZÁVĚR

Aromaticky aktivní látky obsažené v rostlinách jsou nejen nositeli typického aroma byliny, ale také jsou vyhledávanými sloučeninami s možným terapeutickým účinkem. Řada těchto látek však nemá jen pozitivní účinek na lidský organismus, ale mohou mít i negativní dopady jako například potenciální alergeny.

Cílem této práce byla identifikace AAL obsažených v pěti druzích vybraných bylin, konkrétně meduňka lékařská, měsíček lékařský, šalvěj muškátová, ostropestřec mariánský a jeřábina lékařská, s důrazem na potenciální alergeny. K analýze byla vybrána metoda mikroextrakce na pevnou fázi s plynovou chromatografií ve spojení s hmotnostní detekcí.

Vzhledem k tomu, že u části identifikovaných látek nebyly z časových důvodů k dispozici parametry standardů potřebných pro kvantifikaci, nebyla přesná kvantifikace identifikovaných sloučenin provedena. Další navazující experimenty budou zaměřeny na výběr a ověření vhodné metody kvantifikace, aby bylo možné sledovat obsah jednotlivých významných látek v aromatickém profilu bylin.

Celkem bylo v meduňce identifikováno 106 látek včetně 8 alergenů. Nejvíce zastoupenou skupinou byly alkoholy 18 % (19). Měsíček obsahoval 104 sloučenin, z toho 7 alergenů. V této bylině byl také identifikován dimethyl sulfoxid. Hlavní skupinou sloučenin byly rovněž alkoholy 19 % (20). V šalvěji bylo nalezeno 82 sloučenin zahrnujících 5 alergenů, což byl obsahově nejmenší počet alergenních látek z celého souboru analyzovaných bylin. Sklareol, považovaný za typický pro šalvěj, nebyl v této práci detekován. Z 36 % (30) byl obsah AAL tvořen alkeny. V ostropestřci se nacházelo 73 látek včetně 6 alergenů. U této byliny jako jediné byly zároveň popsány látky obsahující síru a dusík. Nejvíce zastoupeny byly sloučeniny ze skupiny alkenů 18% (13) a alkoholů 18% (13). V jeřábině bylo popsáno 110 sloučenin a z toho 9 alergenů, hlavní složku tvořily estery 22 % (24).

Extrakty z bylin patří mezi v praxi často používané přípravky pro aromatizaci potravin. Výsledky studií naznačují, že se takto do potravin mohou dostávat poměrně vysoké koncentrace potenciálně alergenních AAL, přitom jejich přítomnost není v tomto odvětví zatím nijak regulována. Možná je jen otázkou času, kdy se stanoví regulace přídavku těchto potenciálních alergenů v potravinách, vzhledem k velmi častému výskytu aromat ve výrobcích, obdobně jako je tomu u kosmetiky.

6 SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ

1 *Kouzlo vůní: Časopis o vůních, bylinkách a jejich využití* [online]. WordPress, 2015 [cit. 2018-04-15]. Dostupné z: <https://kouzlovuni.cz>

2 JANČA, Jiří a Josef Antonín ZENTRICH. *Herbář léčivých rostlin, 3. díl*. Praha: Eminent, 1995, 287 s. ISBN 80-858-7614-0.

3 SEVERA, František a Miloš RICHTER. *Léčivé rostliny*. Praha: Státní zemědělské nakladatelství, 1971, 326 s. Dostupné také z: <http://www.survivalschool.cz/prvni-pomoc/dok/Lecive%20rostliny.pdf>

4 Meduňka lékařská (*Melissa officinalis*). In: *Dary od přírody: Na každou nemoc vyrostla bylina* [online]. 2015 [cit. 2018-04-15]. Dostupné z: <http://daryodprirody.cz/medunka-lekarska-melissa-officinalis/>

5 KHAYYAL, Mohamed, Mona EL-GHAZALY, Sanaa KENAWY et al. Antiulcerogenic Effect of Some Gastrointestinally Acting Plant Extracts and their Combination. *Arzneimittelforschung*. 2001, **51**(07), 545-553. DOI: 10.1055/s-0031-1300078. ISSN 0004-4172. Dostupné také z: <http://www.thieme-connect.de/DOI/DOI?10.1055/s-0031-1300078>

6 COHEN, R. A., L. S. KUCERA a E. C. HERRMANN. Antiviral Activity of *Melissa officinalis* (Lemon Balm) Extract. *Experimental Biology and Medicine*. 1964, **117**(2), 431-434. DOI: 10.3181/00379727-117-29600. ISSN 1535-3702. Dostupné také z: <http://ebm.sagepub.com/lookup/doi/10.3181/00379727-117-29600>

7 MIKUS, Judith, Michael HARKENTHAL, Dietmar STEVERDING et al. In vitro Effect of Essential Oils and Isolated Mono- and Sesquiterpenes on *Leishmania major* and *Trypanosoma brucei*. *Planta Medica*. 2000, **66**(04), 366-368. DOI: 10.1055/s-2000-8548. ISSN 0032-0943. Dostupné také z: <http://www.thieme-connect.de/DOI/DOI?10.1055/s-2000-8548>

8 NAMJOO, A., M. MIRVAKILI, H. SHIRZAD et al. Biochemical, liver and renal toxicities of *Melissa* of cinals hydroalcoholic extract on balb/C mice. *Journal of HerbMed Pharmacology*. 2013, **2**(2), 35-40. Dostupné také z: <https://pdfs.semanticscholar.org/9dbe/48b873934b7e1455828c2fab244d55c04900.pdf>

9 VERMA, R. S., R. C. PADALIA a A. CHAUHAN. Evaluation of essential oil quality of lemon balm (*Melissa officinalis* L.) grown in two locations of northern India. *Journal of Essential Oil Research*. 2015, **27**(5), 412–416. DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/10412905.2015.1015692>.

10 SHAROPOV, Farukh S., Michael WINK, Davlat R. KHALIFAEV et al. Composition and Bioactivity of the Essential Oil of *Melissa officinalis* L. Growing Wild in Tajikistan. *International Journal of Traditional and Natural Medicines*. Florida, USA, 2013, **2**(2), 86-9. ISSN 2167-1141.

11 CARNAT, A.P., A. CARNAT, D. FRAISSE et al. The aromatic and polyphenolic composition of lemon balm (*Melissa officinalis* L. subsp. *officinalis*) tea. *Pharmaceutica Acta Helveticae*. 1998, **72**(5), 301-305. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0031-6865\(97\)00026-5](https://doi.org/10.1016/S0031-6865(97)00026-5).

12 REHMAN, S., R. LATIEF, K. A. BHAT et al. Comparative analysis of the aroma chemicals of *Melissa officinalis* using hydrodistillation and HS-SPME techniques. *Arabian Journal of Chemistry*. 2013, **10**(1), 2485–2490. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.arabjc.2013.09.015>. ISSN 1878-5352.

13 BECHNÁ, Klára. *FARMAKOLOGIE podle Českého lékopisu 2009* [online]. , 1-126 s. [cit. 2018-04-15]. Dostupné z: http://zahradanabalkone.net/wp-content/uploads/2014/12/prednasky_farmakognosie.pdf

14 ABUDAYYAK, Mahmoud, Ebru ÖZDEMİR NATH a Gül ÖZHAN. Toxic potentials of ten herbs commonly used for aphrodisiac effect in Turkey. *Turkish Journal Of Medical Sciences*. 2015, **45**(1), 496-506. DOI: 10.3906/sag-1401-153. ISSN 13000144. Dostupné také z: <http://journals.tubitak.gov.tr/medical/issues/sag-15-45-3/sag-45-3-5-1401-153.pdf>

15 SOULIMANI, Rachid, Jacques FLEURENTIN, François MORTIER et al. Neurotropic Action of the Hydroalcoholic Extract of *Melissa officinalis* in the Mouse. *Planta Medica*. 1991, **57**(02), 105-109. DOI: 10.1055/s-2006-960042. ISSN 0032-0943. Dostupné také z: <http://www.thieme-connect.de/DOI/DOI?10.1055/s-2006-960042>

16 AUF'MKOLK, M., JONATHAN, C. I., KUBOTA, K., et al. Extracts and Auto-Oxidized Constituents of Certain Plants Inhibit the Receptor-Binding and the Biological Activity of Graves' Immunoglobulins. *Endocrinology*. 1985, **116**(5), 1687-1693. DOI: 10.1210/endo-

116-5-1687. ISSN 0013-7227. Dostupné také z: <https://academic.oup.com/endo/article-lookup/doi/10.1210/endo-116-5-1687>

17 LEACH, Matthew John. *Calendula officinalis* and wound healing: a systematic review. *Wounds: a compendium of clinical research and practice*. 2008, **20**(8), 236-243.

18 Měsíček lékařský – květ. In: *Bylinná valašská sušárna sv. Františka* [online]. 2018 [cit. 2018-04-15]. Dostupné z: <http://www.kvetybyliny.cz/produkt/mesicek-lekarsky-kvet/>

19 YOSHIKAWA, Masayuki, Toshiyuki MURAKAMI, Akinobu KISHI et al. Medicinal Flowers. III. Marigold.(1): Hypoglycemic, Gastric Emptying Inhibitory, and Gastroprotective Principles and New Oleanane-Type Triterpene Oligoglycosides, Calendasaponins A, B, C, and D, from Egyptian *Calendula officinalis*. *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*. 2001, **49**(7), 863-870. DOI: <https://doi.org/10.1248/cpb.49.863>. ISSN 1347-5223.

20 VIDAL-OLLIVIER, E., R. ELIAS, F. FAURE et al. Flavonol Glycosides from *Calendula officinalis* Flowers. *Planta Medica*. 1989, **55**(01), 73-74. DOI: 10.1055/s-2006-961831. ISSN 0032-0943. Dostupné také z: <http://www.thieme-connect.de/DOI/DOI?10.1055/s-2006-961831>

21 NEUKIRCH, Hannes, Michele D'AMBROSIO, Josef Dalla VIA et al. Simultaneous quantitative determination of eight triterpenoid monoesters from flowers of 10 varieties of *Calendula officinalis* L. and characterisation of a new triterpenoid monoester. *Phytochemical Analysis*. 2004, **15**(1), 30-35. DOI: 10.1002/pca.739. ISSN 0958-0344. Dostupné také z: <http://doi.wiley.com/10.1002/pca.739>

22 GUINOT, Pauline, Annick GARGADENNEC, Gilles VALETTE et al. Primary flavonoids in marigold dye: extraction, structure and involvement in the dyeing process. *Phytochemical Analysis*. 2008, **19**(1), 46-51. DOI: 10.1002/pca.1014. ISSN 09580344. Dostupné také z: <http://doi.wiley.com/10.1002/pca.1014>

23 KOWALSKI, Radosław. Studies of Selected Plant Raw Materials as Alternative Sources of Triterpenes of Oleanolic and Ursolic Acid Types. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2007, **55**(3), 656-662. DOI: 10.1021/jf0625858. ISSN 0021-8561. Dostupné také z: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jf0625858>

24 MARUKAMI, Toshiyuki, Akinobu KISHI a Masayuki YOSHIKAWA. Medicinal Flowers. IV. Marigold. (2): Structures of New Ionone and Sesquiterpene Glycosides from

Egyptian *Calendula officinalis*. *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*. 2001, **49**(8), 974-978. DOI: <https://doi.org/10.1248/cpb.49.974>. ISSN 1347-5223.

25 KHALID, Khalid A. a Jaime A. TEIXEIRA DA SILVA. Yield, essential oil and pigment content of *Calendula officinalis* L. flower heads cultivated under salt stress conditions. *Scientia Horticulturae*. 2010, **126**(2), 297-305. DOI: 10.1016/j.scienta.2010.07.023. ISSN 03044238. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0304423810003365>

26 OKOH, O. O., A. A. SADIMENKO a A. J. AFOLAYAN. The Effects of Age on the Yield and Composition of the Essential Oils of *Calendula officinalis*. *Journal of Applied Sciences*. 2007, **7**(23), 3806-3810. DOI: 10.3923/jas.2007.3806.3810. ISSN 18125654. Dostupné také z: <http://www.scialert.net/abstract/?doi=jas.2007.3806.3810>

27 GAZIM, Z. C., C. M. REZENDE, S. R. FRAGA et al. Analysis of the essential oils from *Calendula officinalis* growing in Brazil using three different extraction procedures. *Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas*. 2008, **44**(3), 391-395. DOI: <http://dx.doi.org/10.1590/S1516-93322008000300008>. ISSN 1516-9332.

28 MISHRA, A. K., A. MISHRA a P. CHATTOPADHYAY. Assessment of In Vitro Sun Protection Factor of *Calendula Officinalis* L. (Asteraceae) Essential Oil Formulation. *Journal of Young Pharmacists*. 2012, **4**(1), 17-21. DOI: 10.4103/0975-1483.93575. ISSN 09751483. Dostupné také z: <http://www.jyoungpharm.org/article/564>

29 ARORA, Disha, Anita RANI a Anupam SHARMA. A review on phytochemistry and ethnopharmacological aspects of genus *Calendula*. *Pharmacognosy Reviews*. 2013, **7**(14), 179-. DOI: 10.4103/0973-7847.120520. ISSN 0973-7847. Dostupné také z: <http://www.phcogrev.com/text.asp?2013/7/14/179/120520>

30 BUTNARIU, Monica a Cristina Zepa CORADINI. Evaluation of Biologically Active Compounds from *Calendula officinalis* Flowers using Spectrophotometry. *Chemistry Central Journal*. 2012, **6**(1). DOI: 10.1186/1752-153X-6-35. Dostupné také z: <http://ccj.springeropen.com/articles/10.1186/1752-153X-6-35>

31 JIMÉNEZ-MEDINA, Eva, Angel GARCIA-LORA, Laura PACO et al. A new extract of the plant *calendula officinalis* produces a dual in vitro effect: cytotoxic anti-tumor activity and lymphocyte activation. *BMC Cancer*. 2006, **6**(1), -. DOI: 10.1186/1471-2407-6-119. ISSN 1471-2407.

32 MAOKA, T., K. SUMITOMO et al. Analysis of carotenoid composition in petals of calendula (*Calendula officinalis* L.). *Biosci Biotechnol Biochem.* 2005, **69**(11), 2122-8.

33 FIUME, M. Final Report on the Safety Assessment of *Calendula Officinalis* Extract and *Calendula Officinalis*. *International Journal of Toxicology* [online]. 2001, 20, 13-20 [cit. 2018-04-15]. ISSN 1091-5818.

34 STERER, Nir a Yael RUBINSTEIN. Effect of various natural medicinals on salivary protein putrefaction and malodor production. *Quintessence international.* 2006, **37**(8), 653-658.

35 JANČA, Jiří a Josef A. ZENTRICH. *Herbář léčivých rostlin 4. díl.* Praha: Eminent nakladatelství, 2008, 290 s. ISBN 978-807-2813-780.

36 PEANA, Alessandra T. a Mario D. L. MORETTI. Pharmacological activities and applications of *Salvia sclarea* and *Salvia desoleana* essential oils: *Studies in Natural Products Chemistry: Bioactive Natural Products (Part G)*. 26. Elsevier Science B.V., 2002, s. 391-398. Dostupné také z: https://www.researchgate.net/profile/Alessandra_Peana/publication/281782913_PHARMACOLOGICAL_ACTIVITIES_AND_APPLICATIONS_OF_SALVIA_SCLAREA_AND_SALVIA_DESOLEANA_ESSENTIAL_OILS/links/5624c35608ae93a5c92cc30a.pdf

37 Šalvěj muškátová (Clary Sage). In: *Esenciální oleje: dōTERRA - Dar Země* [online]. 2013 [cit. 2018-04-15]. Dostupné z: <https://www.certifikovane-esencialni-oleje.cz/esencialni-oleje-a-smesi/salvej/>

38 HAO, D. Ch., X. J. GU a P. G. XIAO. Phytochemical and biological research of *Salvia* medicinal resources. *Medicinal Plants: Chemistry, Biology and Omics*. Elsevier, 2015, s. 587–639. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100085-4.00014-1>.

39 *Salvia Sclarea* Oil: A Promising Alternative. *Probotanic* [online]. [cit. 2018-04-21]. Dostupné z: https://www.probotanic.com/pdf_istrazivanja/ulje_divlje_zalfije/ Ulje%20divlje%20zalfije%20-%20hemijski%20sastav,%20aktivne%20supstance,%20rezultati%20istrazivanja,%20medicinska%20upotreba.pdf

40 FARKAŠ, P., M. HOLLÁ, J. TEKEL et al. Composition of the Essential Oils from the Flowers and Leaves of *Salvia sclarea* L. (*Lamiaceae*) Cultivated in Slovak Republic. *Journal*

of *Essential Oil Research*. 2005, **17**(2), 141-144. DOI: <https://doi.org/10.1080/10412905.2005.9698858>.

41 LATTOO, Surrinder K., Rekha Sapru DHAR, Autar K. DHAR et al. Dynamics of essential oil biosynthesis in relation to inflorescence and glandular ontogeny in *Salvia sclarea*. *Flavour and Fragrance Journal*. 2006, **21**(5), 817-821. DOI: 10.1002/ffj.1733. ISSN 0882-5734. Dostupné také z: <http://doi.wiley.com/10.1002/ffj.1733>

42 DŽAMIĆ, Ana, Marina SOKOVIĆ, M. RISTIĆ et al. Chemical composition and antifungal activity of *Salvia sclarea* (*Lamiaceae*) essential oil. *Archives of Biological Sciences*. 2008, **60**(2), 233-237. DOI: 10.2298/ABS0802233D. ISSN 0354-4664. Dostupné také z: <http://www.doiserbia.nb.rs/Article.aspx?ID=0354-46640802233D>

43 SOULELES, Chr. a N. ARGYRIADOU. Constituents of the Essential Oil of *Salvia sclarea* Growing Wild in Greece. *International Journal of Pharmacognosy*. 1997, **35**(3), 218-220. DOI: <https://doi.org/10.1076/phbi.35.3.218.13295>.

44 SIGNORETTO, E., S. A. LAUFER a F. LANG. Stimulating Effect of Sclareol on Suicidal Death of Human Erythrocytes. *Cellular Physiology and Biochemistry*. 2016, **39**(1), 554-564. DOI: <https://doi.org/10.1159/000445647>.

45 FU, Z., H. WANG, X. HU et al. The Pharmacological Properties of *Salvia* Essential Oils. *Journal of Applied Pharmaceutical Science*. 2013, **3**(7), 122-127. DOI: 10.7324/JAPS.2013.3723. ISSN 2231-3354.

46 BAILEY, C. J. a C. DAY. Metformin: its botanical background. *Practical Diabetes*. 2004, **21**(3), 115-117. DOI: <https://doi.org/10.1002/pdi.606>.

47 SLAVÍK, Bohumil. *Květena České republiky 4.díl*. Praha: Academia, 1995, 534 s. ISBN 80-200-0384-3.

48 JANČA, Jiří a Josef Antonín ZENTRICH. *Herbář léčivých rostlin 2. díl*. Praha: Eminent, 1995, 287 s. ISBN 80-858-7604-3.

49 MURRAY, Donna. Goat's Rue, Breastfeeding, and Increasing the Supply of Breast Milk: What Is It, How to Use It, and Is It Safe?. In: *VERYWELLfamily* [online]. [cit. 2018-04-15]. Dostupné z: <https://www.verywellfamily.com/goats-rue-and-increasing-the-supply-of-breast-milk-431841>

50 BARCHUK, O. Z., R. M. LYSIUK, A. I. DENYS et al. Experimental study of goat's rue (*Galega officinalis* L.) herb and its liquid extracts. *The Pharma Innovation Journal*. 2017, **6**(11), 393-397. ISSN 2277- 7695.

51 PEIRETTI, P.G. a F. GAI. Chemical composition, nutritive value, fatty acid and amino acid contents of *Galega officinalis* L. during its growth stage and in regrowth. *Animal Feed Science and Technology*. 2006, **130**(3-4), 257-267. DOI: 10.1016/j.anifeedsci.2006.01.007. ISSN 03778401. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0377840106000174>

52 BHARTI, S. K., N. K. SHARMA, A. K. GUPTA et al. Pharmacological actions and potential uses of diverse Galactogogues in Cattle. *INTERNATIONAL JOURNAL OF PHARMACOLOGY AND THERAPEUTICS*. 2012, **2**(1).

53 BEDEKAR, A., K. SHAH a M. KOFFAS. *Advances in Applied Microbiology: Natural Products for Type II Diabetes Treatment*. 2010, **71**(1), 21-73. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0065-2164\(10\)71002-9](https://doi.org/10.1016/S0065-2164(10)71002-9).

54 SCHMELTZ, L. a B. METZGER. Diabetes/Syndrome X. *Comprehensive Medicinal Chemistry II*. 2007, **6**(1), 417–458. DOI: <https://doi.org/10.1016/B0-08-045044-X/00179-6>.

55 RASEKH, Hamid R., Pardis NAZARI, Mohammad KAMLI-NEJAD et al. Acute and subchronic oral toxicity of *Galega officinalis* in rats. *Journal of Ethnopharmacology*. 2008, **116**(1), 21-26. DOI: 10.1016/j.jep.2007.10.030. ISSN 03788741. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378874107005570>

56 Ostropestřec mariánský: král detoxikace. In: *Magazin životni styl* [online]. 2016 [cit. 2018-04-15]. Dostupné z: <http://www.magazin-zivotni-styl.com/detoxikace-doma/detoxikace-ostropestrcem-marianskym>

57 GREENLEE, Heather, Kathy ABASCAL, Eric YARNELL et al. Clinical Applications of *Silybum marianum* in Oncology. *Integrative Cancer Therapies*. 2016, **6**(2), 158-165. DOI: 10.1177/1534735407301727. ISSN 1534-7354. Dostupné také z: <http://journals.sagepub.com/doi/10.1177/1534735407301727>

58 KROLL, David J., Heather S. SHAW a Nicholas H. OBERLIES. Milk Thistle Nomenclature: Why It Matters in Cancer Research and Pharmacokinetic Studies. *Integrative*

Cancer Therapies. 2016, **6**(2), 110-119. DOI: 10.1177/1534735407301825. ISSN 1534-7354. Dostupné také z: <http://journals.sagepub.com/doi/10.1177/1534735407301825>

59 ESIYOK, D., S. ÖTLES a E. AKCICEK. Herbs as a Food Source in Turkey. *Asian Pacific Journal of Cancer Prevention*. 2004, **5**(1), 334-339.

60 MHAMDI, B., F. ABBASSI, A. SMAOUI et al. Fatty acids, essential oil and phenolics composition of *Silybum marianum* seeds and their antioxidant activities. *Pak J Pharm Sci*. 2016, **29**(3), 953-9.

61 BHATTACHARYA, Sanjib. Milk Thistle (*Silybum marianum* L. Gaert.) Seeds in Health. *Nuts and Seeds in Health and Disease Prevention*. Elsevier, 2011, 2011, s. 759-766. DOI: 10.1016/B978-0-12-375688-6.10090-8. ISBN 9780123756886. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123756886100908>

62 DER MARDEROSIAN, Ara. *The Review of Natural Products: The Most Complete Source of Natural Product Information*. 1. St. Louis, Missouri: Wolters Kluwer Health, 2001, 1672 s. ISBN 9781574391008.

63 TREPKOVÁ, Emilie a František VONÁŠEK. *Vůně a parfémy: tajemství přitažlivosti*. Praha: Maxdorf, 1997. ISBN 80-858-0048-9.

64 APROTOSOAIE, Ana Clara, Monica HĂNCIANU, Irina-Iuliana COSTACHE et al. Linalool: a review on a key odorant molecule with valuable biological properties. *Flavour and Fragrance Journal*. 2014, **29**(4), 193-219. DOI: 10.1002/ffj.3197. ISSN 08825734. Dostupné také z: <http://doi.wiley.com/10.1002/ffj.3197>

65 VELÍŠEK, Jan. *Chemie potravin*. Tábor: OSSIS, 1999. ISBN 80-902-3914-5.

65 PIGGOTT, J. R. *Alcoholic beverages: sensory evaluation and consumer research*. Philadelphia: Woodhead Pub., c2012. Woodhead Publishing in food science, technology, and nutrition, no. 225. ISBN 978-085-7095-176.

66 *Nařízení Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1334/2008 o látkách určených k aromatizaci a některých složkách potravin vyznačujících se aromatem pro použití v potravinách nebo na jejich povrchu*. In. Evropský parlament, Rada Evropské unie, 2008. Dostupné také z: <http://eur-lex.europa.eu/legal-content/CS/TXT/?qid=1523549304467&uri=CELEX:02008R1334-20170713>

67 MACHOVCOVÁ, Alena. Skryté a neočekávané alergeny v kosmetických přípravcích. *Dermatologie pro praxi*. 2007, č. 1, s. 6-9. ISSN 1802-2960.

68 STORRS, Frances. Allergen of the Year: Fragrance. *Dermatitis: contact, atopic, occupational, drug: official journal of the American Contact Dermatitis Society, North American Contact Dermatitis Group*. roč. 18, č. 1, s. 3-7. ISSN 1710-3568.

69 Nařízení Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1223/2009 ze dne 30. listopadu 2009 o kosmetických přípravcích. In. Evropský parlament, Rada Evropské unie, 2009. Dostupné také z: <http://eur-lex.europa.eu/legal-content/CS/TXT/?qid=1523549433177&uri=CELEX:02009R1223-20171225>

70 PubChem: Open Chemistry Database [online]. National Institutes of Health, 2004 [cit. 2018-04-12]. Dostupné z: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>

71 Material Safety Data Sheet: alpha-Amyl Cinnamic Aldehyde. *Spectrumchemicals* [online]. Gardena, CA: Spectrum Laboratory Products, 2010 [cit. 2018-04-13]. Dostupné z: <https://www.spectrumchemical.com/MSDS/A0336.pdf>

72 VELÍŠEK, Jan. *Chemie potravin 2*. Vyd. 2. upr. Tábor: OSSIS, 2002. ISBN 80-86659- 01-1.

73 BRIDGES, James, Wolfgang DEKANT, James E. KLAUNIG et al. Comments on the safety assessment of decamethylcyclopentasiloxane (D5) published in regulatory toxicology and pharmacology, 2017, 83: 117–118. *Regulatory Toxicology and Pharmacology* [online]. Elsevier, 2017, 89, 305-306 [cit. 2018-04-13]. DOI: 10.1016/j.yrtph.2017.07.033. ISSN 0273-2300.

74 KRATOCHVÍL, František.: Epikutánní testy [online]. 2007 [cit. 2014-04-28]. Dostupné z: <http://www.epitesty.cz/default.asp?inc=fset>

75 LAMAS, J. Pablo, Lucia SANCHEZ-PRADO, Carmen GARCIA-JARES et al. Development of a solid phase dispersion-pressurized liquid extraction method for the analysis of suspected fragrance allergens in leave-on cosmetics. *Journal of Chromatography A*. 2010, 1217(52), 8087-8094. DOI: 10.1016/j.chroma.2010.10.120. ISSN 00219673. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S002196731001530X>

76 BHATIA, S.P., G.A. WELLINGTON, J. et.al. Fragrance material review on alpha-amylcinnamyl alcohol. *Food and Chemical Toxicology*. 2007, **45**(1), 32-39. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fct.2007.09.026>.

77 CHEN, W. a A.M. VILJOEN. Geraniol — A review of a commercially important fragrance material. *South African Journal of Botany*. 2010, **76**(4), 643-651. DOI: 10.1016/j.sajb.2010.05.008. ISSN 02546299. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0254629910001559>

78 Material Safety Data Sheet: α -hexylcinnamaldehyde. *SBTC* [online]. Santa Cruz, California: Santa Crus Biotechnology, Inc., 2009 [cit. 2018-04-13]. Dostupné z: <http://datasheets.scbt.com/sc-223762.pdf>

79 LAPCZYNSKI, A, J LALKO, V. T. POLITANO et al. Fragrance material review on alpha-iso-methylionone. *Food and chemical toxicology: an international journal published for the British Industrial Biological Research Association* [online]. 2007, 45 Suppl 1, S280 [cit. 2018-04-14]. ISSN 0278-6915.

80 ROWE, David J. *Chemistry and technology of flavors and fragrances*. Oxford: Blackwell, 2005. ISBN 14-051-1450-9.

81 SIDES, Alasdair, Kevin ROBARDS a Stuart HELLIWELL. Developments in extraction techniques and their application to analysis of volatiles in foods. *Trends in analytical chemistry*. 2000, **19**(5), 322-329. ISSN 0165-9936.

82 PILLONEL, L., J. O. a R. TABACCHI. Rapid preconcentration and enrichment techniques for the analysis of food volatile. A review. *LWT – Food Science and Technology*. 2002, **35**(1), 1-14. ISSN 0023-6438.

83 CUYPER, Marcel de. a Jeff W. M. BULTE. *Physics and chemistry basis of biotechnology*. Boston: Kluwer Academic Publishers, c2001, 334 s. ISBN 07-923-7091-0.

84 TAYLOR, A. J. *Food flavour technology*. 2. Blackwell Publishing, 2002, 316 s. ISBN 978-1-84127-224-5.

85 SALVADOR, Amparo a Alberto CHISVERT. *Analysis of cosmetic products: Perfumes in Cosmetics. Regulatory Aspects and Analytical Methods for Fragrance Ingredients and other*

Related Chemicals in Cosmetics. Amsterdam: Elsevier, 2007, 506 s. ISBN 978-0-444-52260-3.

86 MITSUI, Takeo. *New cosmetic science*. New York: Elsevier Science, 1997. ISBN 04-448-2654-8.

87 DO, Thi Kieu Tiên, Francis HADJI-MINAGLOU, Sylvain ANTONIOTTI a Xavier FERNANDEZ. Authenticity of essential oils. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2015, **66**, 146-157. DOI: 10.1016/j.trac.2014.10.007. ISSN 01659936. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0165993614002519>

88 VŠCHT. *Látky vonné a chuťové* [online]. [cit. 2018-04-09]. Dostupné také z: <<https://web.vscht.cz/koplikr/Látky%20vonné%20a%20chuťové.pdf>>

89 KLOUDA, Pavel. *Moderní analytické metody*. 2., upr. a dopl. vyd. Ostrava: Pavel Klouda, 2003. ISBN 80-863-6907-2.

90 PAWLISZYN, Janusz. *Solid phase microextraction: theory and practice*. New York: Wiley-VCH, c1997. ISBN 04-711-9034-9.

91 CHARVÁTOVÁ, M. *Multimediální pomůcka pro předmět Chemie potravních řetězců: Využití metody SPME při analýze látek pocházejících z polymerů kontaminujících potravní řetězce (SOP)* [online]. 26.6. 2012 [cit. 2018-04-11]. Dostupné z: <<http://soubory.vfu.cz/fvhe/metoda-spme/>>

92 ŠTULÍK, Karel. *Analytické separační metody*. Praha: Karolinum, 2004. ISBN 80-246-0852-9.

93 PECINOVÁ, Ester. *Aromaticky aktivní látky vybraných druhů léčivých rostlin*. Brno, 2017, 105 s. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně. Fakulta chemická. Vedoucí práce Ing. Eva Vítová, Ph.D.

7 SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK

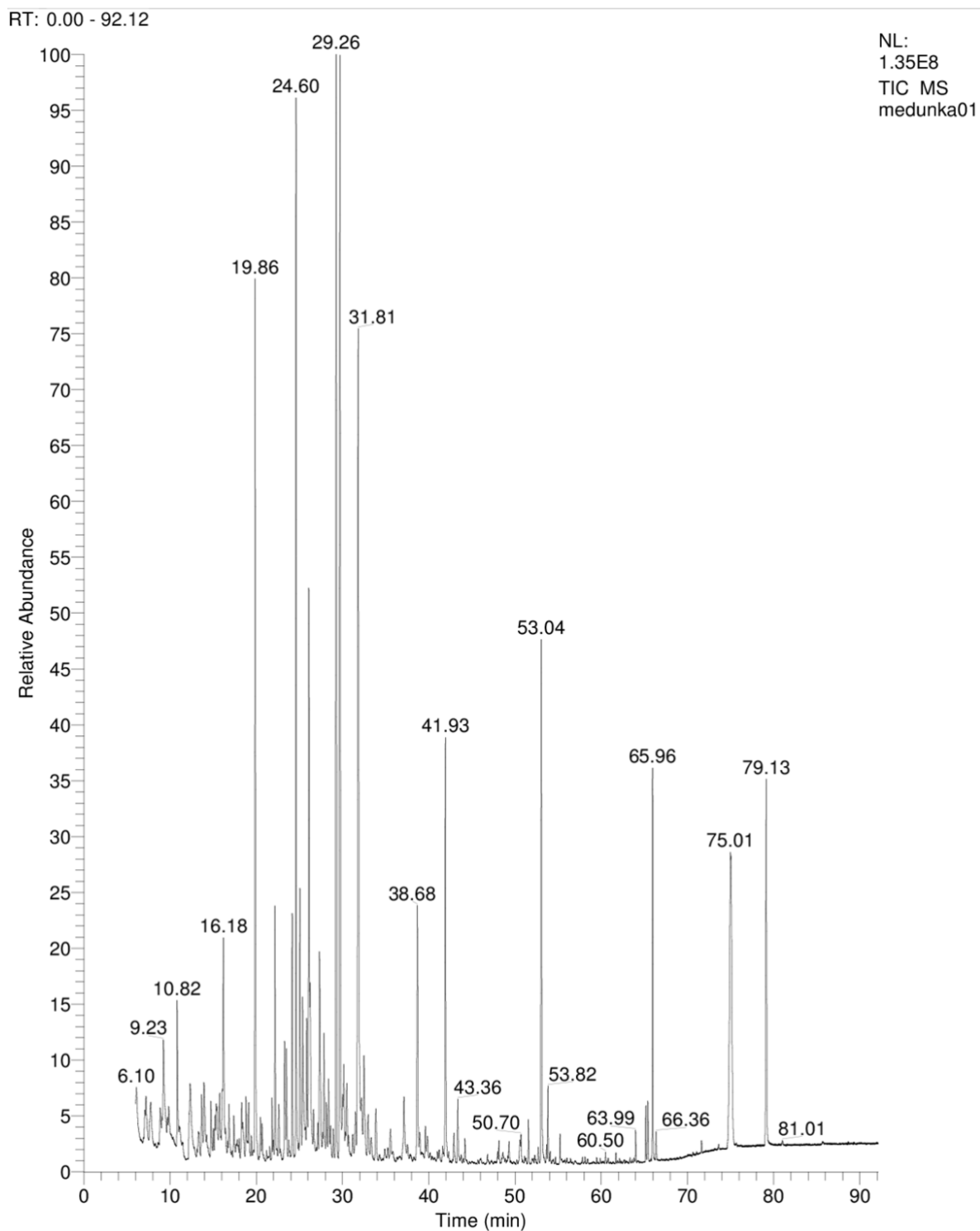
AAL	Aromaticky aktivní látky
ADI	Acceptable daily intake (přijatelný denní příjem)
DI-SPME	Direct immerse (metoda mikroextrakce s přímým ponořením vlákna do vzorku)
DNA	Deoxyribonucleic acid (Deoxyribonukleová kyselina)
EO	Esenciální olej
FAD	Food and Drug Administration of the United States
FID	Flame ionization detection (plamenově ionizační detektor)
FTIR	Fourier transform infrared spectroscopy (infračervená spektrometrie s Furierovou transformací)
GABA	γ -aminobutyric acid (kyselina γ -aminomáselná)
GC	Gas chromatography (plynová chromatografie)
GC-FID	Gas chromatography-flame ionization detection (plynová chromatografie s plamenově ionizačním detektorem)
GC-MS	Gas chromatography-mass spectometry (plynová chromatografie s hmotnostní detekcí)
GC-O	Gas chromatography-olfactometry (plynová chromatografie ve spojení s olfaktometrickým detektorem)
GRAS	Generally Recognized as Safe
HS	Headspace
HS-SPME	Mikroextrakce pevnou fází z prostoru nad vzorkem (headspace)
JECFA	Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives
LD50	Dosis letalis media (střední smrtná dávka, která způsobí úhyn 50 % sledované populace)
MS	Mass spectometry (hmotnostní detekce)
NIR	Near-infrared spectroscopy (blízká infračervená spektroskopie)
NMR	Nuclear magnetic resonance (nukleární magnetická rezonance)
SPME	Solid phase microextraction (mikroextrakce pevnou fází)
TCD	Thermal conductivity detector (tepelně vodivostní detektor)
UV/VIS	Ultraviolet Visible Spectroscopy
WHO	World Health Organization (Světová zdravotnická organizace)

8 SEZNAM PŘÍLOH

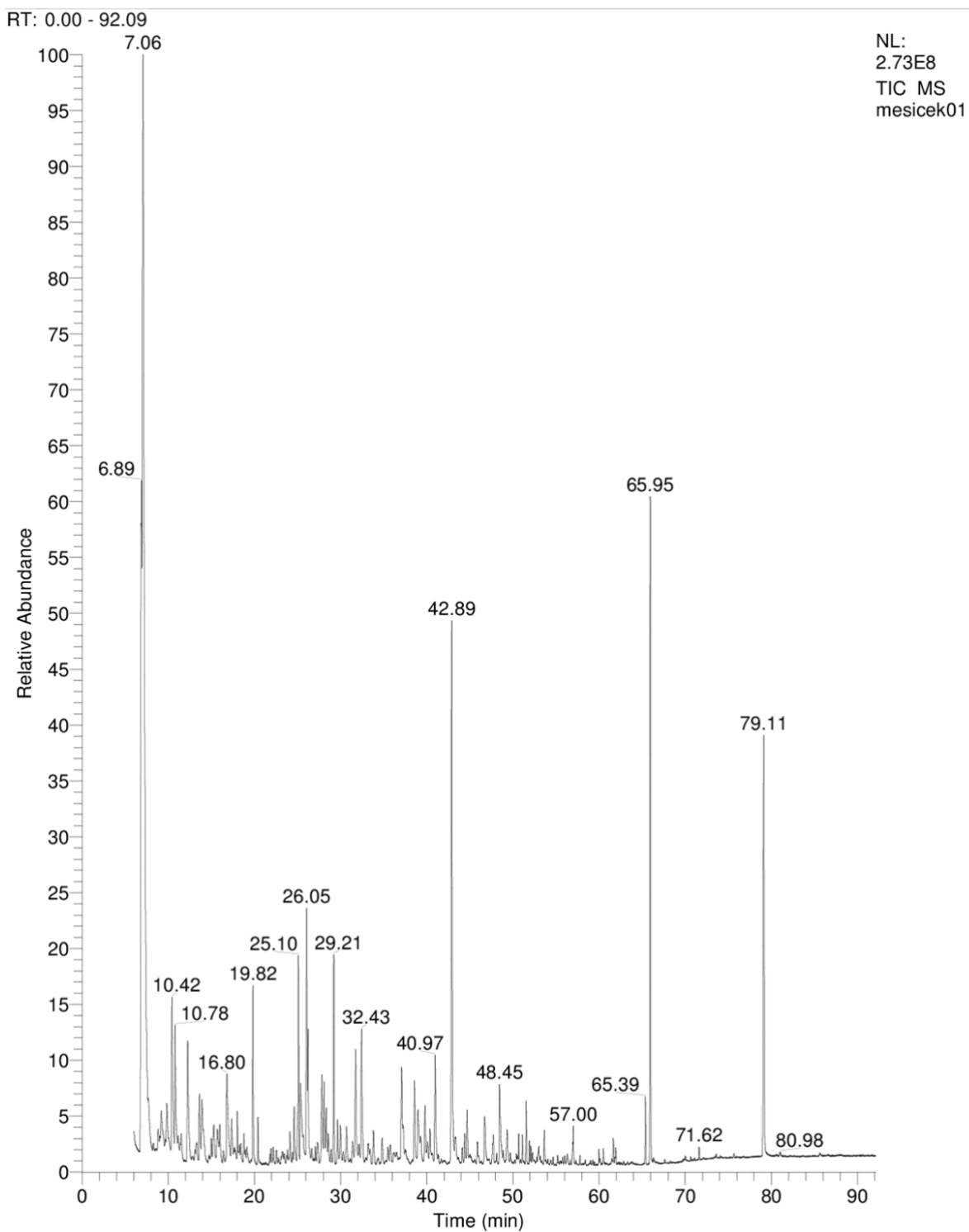
- Příloha 1 Chromatogram těkavých látek ve vzorku meduňky lékařské
- Příloha 2 Chromatogram těkavých látek ve vzorku měsíčku lékařského
- Příloha 3 Chromatogram těkavých látek ve vzorku šalvěje muškátové
- Příloha 4 Chromatogram těkavých látek ve vzorku ostropestřce mariánského
- Příloha 5 Chromatogram těkavých látek ve vzorku jeřábiny lékařské

9 PŘÍLOHY

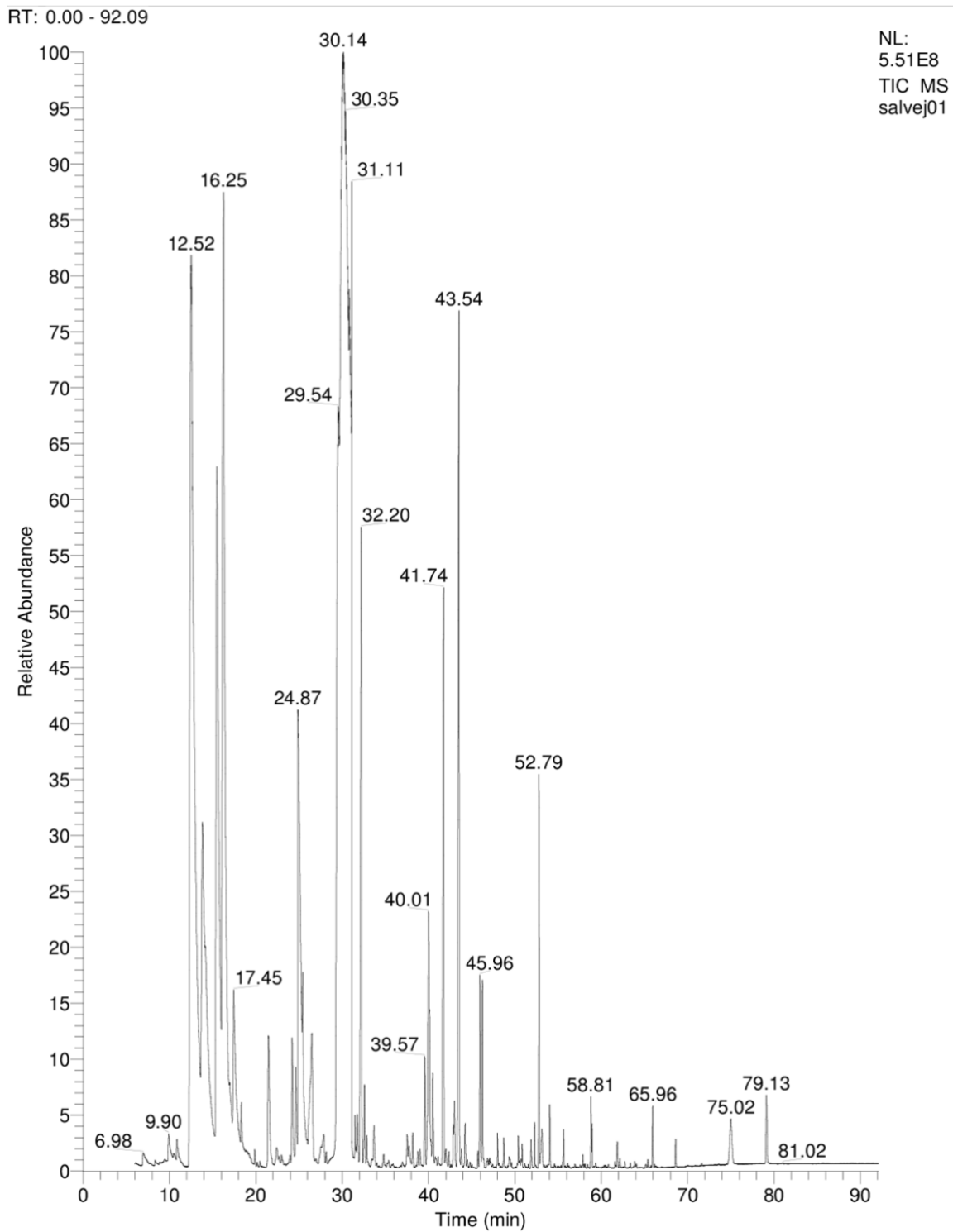
Příloha 1 Chromatogram těkavých látek ve vzorku meduňky lékařské. Retenční časy odpovídají identifikovaným sloučeninám v tab. 12.



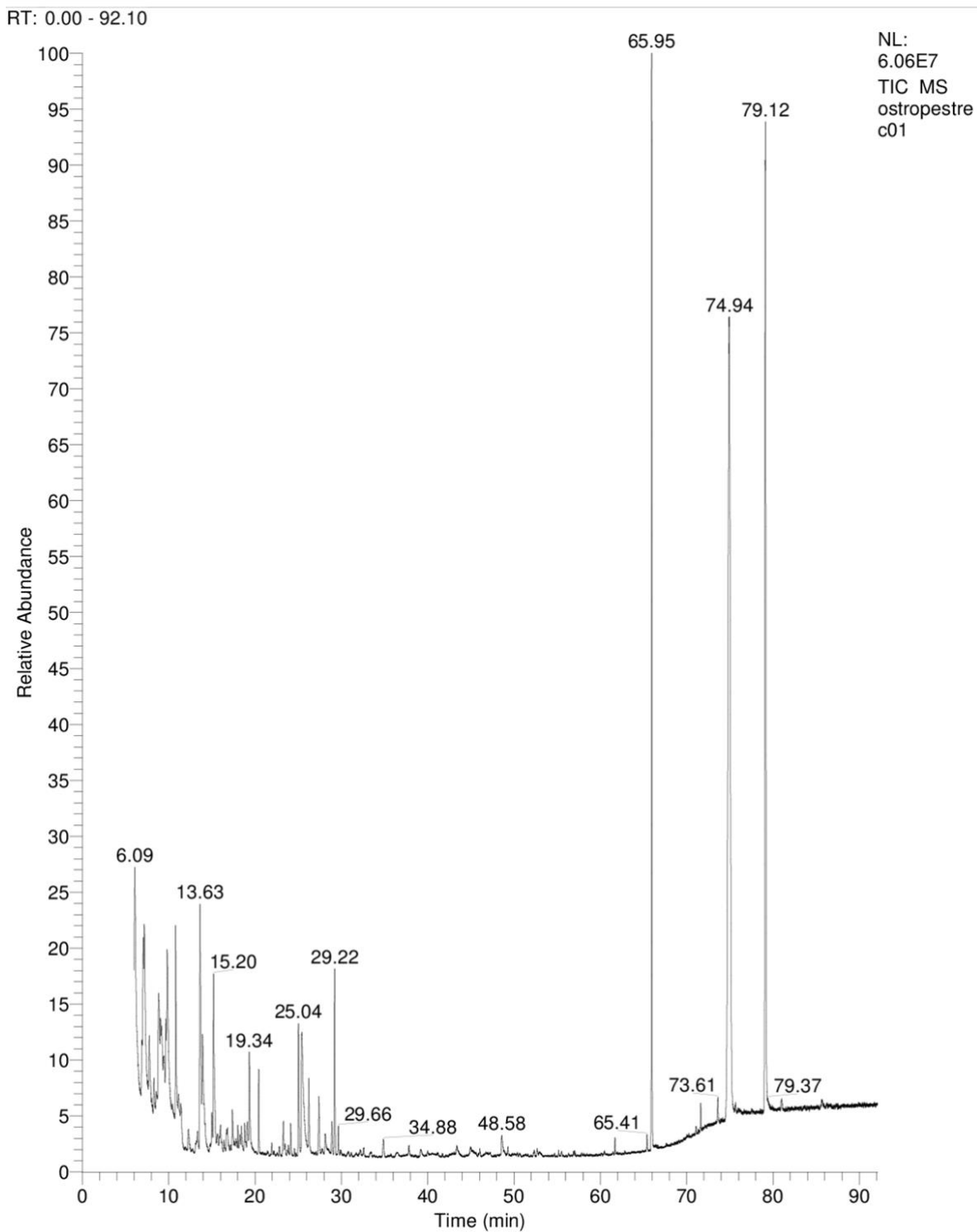
Příloha 2 Chromatogram těkavých látek ve vzorku měsíčku lékařského. Retenční časy odpovídají identifikovaným sloučeninám v tab. 13.



Příloha 3 Chromatogram těkavých látek ve vzorku šalvěje muškátové. Retenční časy odpovídají identifikovaným sloučeninám v tab. 14.



Příloha 4 Chromatogram těkavých látek ve vzorku ostropestřce mariánského. Retenční časy odpovídají identifikovaným sloučeninám v tab. 15.



Příloha 5 Chromatogram těkavých látek ve vzorku jeřábiny lékařské. Retenční časy odpovídají identifikovaným sloučeninám v tab. 16.

