

## **Abstrakt**

Tato disertační práce shrnuje výsledky experimentů, na kterých jsem pracovala během svého postgraduálního studia zaměřeného na nové metody hmotnostní spektrometrie pro stopovou analýzu látek v lidském dechu.

Disertační práce je rozdělena na teoretickou a experimentální část. Úvodní kapitola shrnuje současný výzkum v oblasti analýzy dechu, přičemž popisuje metabolity běžně obsažené v dechu, benefity a podněty této metody pro terapeutické monitorování, klinickou diagnózu a též současné oblasti aplikace. Další kapitola teoretické části popisuje techniky vhodné pro tuto oblast výzkumu, se zvláštním důrazem na hmotnostně spektrometrické techniky (zejména pak hmotnostní spektrometrii v proudové trubici s vybranými ionty, SIFT-MS, metodu, jež umožňuje přesnou kvantifikaci stopových plynů a par ve vlhkém vzduchu/lidském dechu). Obě kapitoly jsou zpracovány formou rešerše.

Navazující kapitoly se pak přímo týkají mého vlastního výzkumu a popisují provedené experimenty i dosažené výsledky. Experimentální část „Výsledky a diskuze“ je rozdělena do několika podkapitol, jež jsou koncipovány jako komentáře již publikovaných výsledků v impaktovaných časopisech. První podkapitola se detailně zabývá iontovou chemií (základ metody SIFT-MS), včetně stanovení poměrů větvení a rychlostních konstant reakcí reakčních iontů s vybranými karboxylovými kyselinami a možnými biomarkery zánětlivých onemocnění střev, IBD. Další sekce se pak věnují třístranným asociačním reakcím u reakcí, kde hraje důležitou roli přítomnost vodní páry ve vzorku (právě případ analýzy dechu) a optimalizací SIFT-MS kinetické knihovny pro přesnou kvantifikaci pomocí této metody. Poslední dvě sekce se již věnují aplikaci SIFT-MS pro analýzu dechu a popisují nejen výsledky získané v oblasti IBD, ale také problémy, na které jsme během mého výzkumu narazili - zejména problematiku nečistot uvolňovaných z Nalophanových sáčků (off-line analýza), jež mohou významně ovlivnit analýzu dechu pomocí SIFT-MS, kde jsou stanovovány látky o velmi nízké koncentraci.