

Abstrakt

Tato práce shrnuje experimenty, na nichž jsem pracovala během svého postgraduálního studia zaměřeného na aplikaci hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty (SIFT-MS) v interdisciplinárním výzkumu. SIFT-MS je metoda, která v reálném čase umožňuje stanovení stopových koncentrací plynných látek a par v okolní atmosféře a lidském dechu.

Disertace je rozdělena do několika částí. Úvodní dvě kapitoly stručně shrnují historii hmotnostní spektrometrie a vymezují kvantitativní metody PTR-MS a SIFT-MS. Třetí část práce se detailně věnuje historii vzniku SIFT-MS počínaje principy techniky proudové trubice (SIFT), která byla používána ke studiu reakcí iontů s molekulami v plynné fázi a která rovněž tvoří základ metody SIFT-MS. V následující kapitole jsou shrnuty základy iontové chemie tří prekurzorů H_3O^+ , NO^+ a O_2^{+} , které jsou používány k ionizaci neutrálních molekul vzorku v hmotnostním spektrometru *Profile 3* SIFT-MS. Čtvrtá kapitola je zaměřena na těkavé organické látky a jejich různorodý původ: bakteriální, rostlinný a metabolity lidského dechu, jež mohou být analyzovány v reálném čase pomocí SIFT-MS.

Kapitola “Výsledky a Diskuse” je rozdělena do několika podkapitol, které jsou koncipovány jako komentáře již publikovaných výsledků v impaktovaných časopisech. První podkapitola se detailně věnuje iontové chemii, výpočtu rychlostních konstant reakcí prekurzorových iontů H_3O^+ , NO^+ a O_2^{+} s neutrálními molekulami vzorku - fyto-genými estery a sedmi izomery hexanolu. Další dvě sekce se již věnují aplikaci SIFT-MS v oblasti klinické diagnostiky. Jedná se především o hledání vhodných biomarkerů onemocnění cystické fibrózy a zánětlivých střevních onemocnění. Studium populační dynamiky tří bakteriálních druhů prostřednictvím monitorování těkavých látek, které tyto bakterie uvolňují do svého okolí se zabývá další podkapitola. SIFT-MS metoda byla rovněž použita v problematice rostlinné fyziologie. Látky, které rostliny uvolňují do svého okolí přirozeně nebo v procesu fytovolatilizace byly sledovány v reálném čase. Posledním tématem celé práce je studium plynných povýbuchových reziduí vysoce energetického materiálu FOX-7.