

Posudek na disertační práci

Kristýna Sovová: Hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty, SIFT-MS

Předložená disertační práce je věnována aplikaci hmotnostní spektroskopie v uspořádání SIFT-MS (Selected Ion Flow Tube Mass Spectrometry). Toto zařízení bylo vyvinuto a je vhodné pro detekci stopových množství příměsí plynů ve vzduchu. SIFT-MS používá tři primární ionty (H_3O^+ , O_2^+ a NO^+) a analyzuje produkty reakce těchto iontů s chemickými látkami obsaženými ve vzorku vzduchu. Spektrometr SIFT-MS je schopen v reálném čase kvantitativně charakterizovat množství příměsí ve vzduchu s citlivostí na úrovni ppmv až ppbv. Disertační práce má interdisciplinární charakter sahající od fyziky a fyzikální chemie k mikrobiologii a medicíně.

Předložená disertační práce je rozdělena na šest částí. V první části je formulován cíl práce - použití SIFT-MS v interdisciplinárních oblastech výzkumu. Druhá část obsahuje stručné shrnutí historie použití hmotové spektroskopie pro detekci stopového množství látek v plynu. Třetí část je věnována vývoji, konstrukci a charakterizaci SIFT-MS (varianta *Profile 3*). V této části jsou popsány základní reakce iontů H_3O^+ , O_2^+ a NO^+ a kvantitativní analýza dat. Čtvrtá, poměrně rozsáhlá kapitola detailně popisuje některé těkavé organické látky různého biologického původu. Uvedeny a diskutovány jsou především látky, které souvisejí s metodou SIFT-MS, nebo s prováděným výzkumem, např. látky detekované v lidském dechu.

Pátá kapitola je věnována aktuálním výsledkům disertační práce. Kapitola je rozdělena do několika podkapitol, které jsou psané jako komentář k již publikovaným výsledkům. Publikace jsou v příloze a jsou součástí předložené disertační práce. Hned první dvě podkapitoly detailně popisují výsledky studia reakcí používaných primárních iontů s šesti estery a sedmi izomerními formami hexanolu.

Další podkapitoly jsou věnovány použití SIFT-MS v oblasti klinické diagnostiky. Jedna se o analýzu dechu při určitých onemocněních a hledání vhodných biomarkerů. Zajímavé a hodnotné je studium populační dynamiky tří bakteriálních druhů a též studium související s rostlinnou fyziologií. Poslední podkapitola je věnována studiu plyných povýbuchových reziduí při laserem indukovaném zapálení výbušniny FOX-7.

Práce je napsaná jasně, výstižně a bez zjevných chyb. Pokud bych chtěl něco vytknout, tak snad nepřehlednost některých grafů, např. Fig. 5.5 by měl mít logaritmickou škálu na ose y. Též mi není jasné, proč je ve Fig. 5.2 a 5.4 vynášena časová závislost, když podle textu jde spíše o závislost na toku hexanolu. Ale to všechno jsou spíše formální nedostatky.

Otázky a poznámky.

- Jak je při analýze brán v úvahu výskyt izotopu uhlíku ^{13}C ?
- Jak ovlivňují procesy na povrchu vstupní kapiláry citlivost SIFT-MS?
- Čistě z technického hlediska bych chtěl vědět tok He a jeho tlak ve flow tube. S tím souvisí i vysvětlení, proč se nepoužívá jako nosný plyn přímo vzduch. Zajímalo by mne též kvantitativní srovnání SIFT-MS a PTR-MS.
- Nepochopil jsem, proč je při studiu FOX-7 tak vysoké pozadí etanolu (Table 2).

Závěr

Předložená disertační práce se zabývá vysoce aktuální problematikou. Obsluha aparatury, její testování i prováděné experimenty a jejich analýza jsou velice náročné. Velice si cením interdisciplinárního charakteru práce. Autorka prokázala schopnost samostatné tvůrčí a vědecké činnosti, zvolila vhodné metody pro měření a pro zpracování výsledků. Předložená práce má vysokou vědeckou úroveň, což kromě samotné práce ukazuje i kvalitou a počtem publikací souvisejících s prováděným výzkumem.

Práce splňuje zákonem stanovené podmínky pro disertační práci a proto ji doporučuji přijmout k obhajobě.

Prof. RNDr. Juraj Glosík, DrSc.,

KFPP, MFF UK
V Holešovičkách 2
Praha 8