

Abstrakt

Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra analytické chemie

Kandidát: Stanislav Pecha

Školitel: doc. PharmDr. Lucie Nováková, Ph.D.

Název diplomové práce: **Porovnání ESI a APCI ionizace při vývoji UHPLC-MS/MS metodiky pro stanovení fenolických kyselin.**

Fenolické kyseliny jsou aromatické sekundární metabolity široce rozšířené v celé rostlinné říši. Tato práce byla zaměřena na vývoj metody pro stanovení skupiny fenolických kyselin pomocí ultra vysokoúčinné kapalinové chromatografie ve spojení s hmotnostním spektrometrem typu trojitého kvadrupólu. K separaci analytů byla použita kolona BEH C₁₈ (1,7 μm; 2,1 x 100 mm). V rámci této práce byly optimalizovány parametry hmotnostního spektrometru s využitím ionizace elektrosprejem a chemické ionizace za atmosférického tlaku. Na závěr byla hodnocena citlivost, linearita a opakovatelnost metody.

Nejprve byl proveden základní sken směsi analytů a byly vybrány vhodné prekursorové ionty. Následovala optimalizace iontového zdroje (ionizace ESI⁻ a APCI⁻). Dalším krokem bylo provedení skenu produktových iontů a výběr vhodných iontových přechodů pro kvantifikační mód SRM a optimalizace jejich kolizních energií. Po optimalizaci nastavení byla změřena opakovatelnost (RSD < 1% pro retenční čas; RSD < 10% pro plochu píků, kromě isoferulové, skořicové a sinapové), citlivost (LOQ = 0,007 – 6,600 μg·ml⁻¹ pro ESI⁻ a 0,007 – 6,600 μg·ml⁻¹ pro APCI⁻) a linearita (všechny analyty $r^2 \geq 0,9900$ mimo isoferulové, skořicové a sinapové).

Elektrosprej v negativním módu byl pro analýzu směsi fenolických kyselin za těchto podmínek vybrán jako nejvhodnější. Citlivost pro kyseliny: vanillovou, isoferulovou a skořicovou byla nízká.

Klíčová slova: kys. shikimová, kys. gallová, kys. protokatechová, kys. gentisová, kys. chlorogenová, kys. vanillová, kys. kávová, kys. syringová, kys. o-kumarová, kys. m-kumarová, kys. p-kumarová, kys. ferulová, kys. isoferulová, kys. sinapová, kys. rozmarýnová, kys. skořicová, UHPLC-MS/MS, fenolické kyseliny.