

Abstrakt

Tato práce shrnuje výzkum, který byl v letech 2009-2013 řešen jako součást mého posgraduálního studia zaměřeného na aplikaci hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty (SIFT-MS) v interdisciplinárním výzkumu. SIFT-MS je metoda, která umožňuje kvantitativní stanovení stopových koncentrací plyných látek a par v okolní atmosféře a lidském dechu v reálném čase.

Disertace je rozdělena do několika částí. První část stručně shrnuje historii hmotnostní spektrometrie s důrazem na kvantitativní metody jako PTR-MS nebo SIFT-MS. Druhá část 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. Čtvrtá kapitola je úvodem do Další část je zaměřena na těkavé organické látky a jejich původ: bakteriální, rostlinný a metabolity lidského dechu, jež mohou být analyzovány v reálném čase pomocí SIFT-MS.

Hlavní část "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 v SIFT-MS, výpočtu rychlostních konstant reakcí prekurzorových iontů H_3O^+ , NO^+ a O_2^+ s neutrálními molekulami vzorku (fytogenní estery a izomery hexanolu) a distribuce vzniklých iontových produktů. 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 na základě těkavých látek, které tyto bakterie uvolňují do svého okolí se zabývá následující sekce. SIFT-MS metoda byla rovněž použita v problematice rostlinné fyziologie. Látky, které rostliny uvolňují do svého okolí přirozeně nebo v procesu fytovolatilizace byly sledovány online pomocí Profile 3 SIFT-MS přístroje. Posledním tématem celé práce je studium plyných povýbuchových reziduí vysoce energetického materiálu FOX-7. SIFT-MS metoda tak byla zapojena i do projektu