

## Abstrakt (CZ)

V první části disertační práce se porovnávají ionizační reakce v APCI zdroji v přítomnosti, respektive nepřítomnosti krytu iontového zdroje (angl. „housing“). Pro účel studie těchto rozdílů se modifikoval komerční APCI zdroj tak, aby ho bylo možné použít jako otevřený i jako uzavřený zdroj. V pozitivním módu byla pozorovaná rozdílná ionizace u nepolárních sloučenin rozpuštěných v aprotických rozpouštědlech (toluenu, chloroformu a sírouhliku). Zatímco v otevřeném zdroji převažovaly protonované molekuly nepolárních sloučenin, v uzavřeném zdroji byly většinou přítomny jejich radikalkationty. Zvýšená protonace v otevřeném zdroji byla způsobena pronikáním molekul vody do ionizačního prostoru. Voda kromě toho reagovala v otevřeném zdroji s alkyny za vzniku iontu  $[M + 19]^+$ . Fragmentační studie potvrdila, že se jednalo o 2-methylketony, které vznikaly adicí vody na alkyny dle Markovnikovho pravidla. Tím se potvrdil výskyt artefaktu v otevřeném zdroji, který může představovat komplikaci při kvalitativních analýzách. Dále bylo v otevřeném zdroji pozorováno potlačení tvorby iontu  $[M + 55]^{+}$  atmosférickým kyslíkem. V uzavřeném zdroji vznikl ion  $[M + 55]^{+}$  reakcí nenasycených sloučenin s acetonitrilem, přičemž jeho fragmentací bylo možné zjistit polohu dvojně vazby nenasycené sloučeniny. Z toho vyplývá, že některé metody používané v uzavřeném komerčním APCI jsou v otevřených APCI zdrojích nepoužitelné. V negativním módu se v otevřeném zdroji potlačovaly reakce na bázi přenosu náboje. Na základě těchto poznatků se ukázal uzavřený zdroj jako lepší alternativa, protože na rozdíl od otevřeného zdroje lze přesně kontrolovat reakční prostředí přidávkem žádaných aditiv (jako vody nebo kyslíku) do mobilní fáze, nebo nebulizačního plynu.

V druhé části práce bylo popsáno testování třech iontových zdrojů APCI pro nízké průtoky vzorku (přibližně 0,05 až 10,0  $\mu\text{l}/\text{min}$ ). Jednalo se o mikročipový APCI zdroj, APCI zdroj s otevřeným trubicovým zmlžovačem a GDVN-APCI zdroj. Všechny tři zdroje se ukázaly jako lepší varianty pro analýzu přímou infuzí, než komerční APCI zdroj díky stabilnějšímu signálu a nižším limitům detekce testovaných látek. APCI zdroj s otevřeným trubicovým zmlžovačem měl oproti ostatním zdrojům výhodu v tom, že jeho konstrukce byla jednoduchá a levná. Pro spojení HPLC s MS ale není vhodný kvůli pozorovanému chvostování píků a paměťových efektů. Pro změnu mikročipový APCI zdroj (demonstrováno již v jiných pracích) a GDVN-APCI zdroj jsou použitelné pro systém LC/MS.

APCI zdroj s otevřeným trubicovým zmlžovačem i mikročipový APCI zdroj byly citlivé na velmi vysoké teploty, při kterých po zplynění přicházejícího kapalného vzorku docházelo po určité době k ucpání kapiláry přivádějící kapalným vzorek. Naproti tomu GDVN-APCI zdroj generoval místo par rozpouštědel úzký sprej. Kapky spreje stříkající do vzdálenosti přibližně 10 cm se odpařovaly dál za místem, kde se sprej generoval, pomocí odporového topení. Díky tomu nebylo v případě GDVN-APCI zdroje pozorováno ucpání kapiláry přivádějící kapalným vzorek. Výhody GDVN-APCI zdroje poukazují na jeho velký potenciál pro spojení HPLC a MS.

**Klíčová slova:** chemická ionizace za atmosférického tlaku, korónový výboj, virtuální tryska s koaxiálním tokem plynu, reakce v plynné fázi, kryt iontového zdroje, hmotnostní spektrometrie, mikročip, miniaturizace, zmlžovač, otevřený trubicový zmlžovač