

Abstrakt: Metoda hmotnostní spektrometrie pomocí chemické ionizace je účinná analytická technika, umožňující detekovat v reálném čase stopová množství organických těkavých látek přítomné ve vzduchu. Procesy vedoucí k ionizaci organických molekul, nutné k jejich detekci a následnou identifikaci, jsou bohužel často ovlivněné přítomností vodní páry. V představené práci jsem studoval vliv vodní páry na chemii iontů a její následní vliv na citlivost a selektivitu metod hmotnostní spektrometrie pomocí chemické ionizace.

Pro studium jsme využili několik hmotnostně-spektrometrických přístrojů, mimo jiné techniku hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty (SIFT-MS), techniku hmotnostní spektrometrie pomocí reakce přenosu protonu (PTR-MS) a techniku hmotnostní spektrometrie v proudově-driftové trubici s vybranými ionty (SIFDT-MS). Experimentální studie je doplněná teoretickými simulacemi studovaných procesů pomocí autorem vytvořeným simulačním programem KIMI.

V disertační práci prezentuji výsledky zkoumání iontové chemie molekul formaldehydu, glyoxalu a ftalátů pomocí H_3O^+ , NO^+ and O_2^+ reakčních iontů, přičemž se zaměřuji na pochopení sekundárních reakcí iontových produktů s vodní párou. Následně jsem také studoval sekundární reakce protonovaných a hydratovaných molekul kyseliny mravenčí s acetonem. V práci jsem nakonec zkoumal analýzu monoterpenů kombinací rychlé plynové chromatografie a SIFT-MS, která mimo jiné umožňuje redukovat vliv vodní páry na iontovou chemii.