

## Abstrakt

Nitrososloučeniny jsou kontaminanty piva s karcinogenními účinky, které se přirozeně tvoří během pivoarského procesu. Obecně jsou děleny na těkavé a netěkavé. Dostatečně charakterizované a prokázané karcinogenní látky jsou těkavé *N*-nitrosaminy, což nelze konstatovat pro strukturně neznámé zástupce netěkavých nitrososloučenin. Tato neznalost limituje vývoj nových analytických metod vedoucí k přesnějšímu zhodnocení a kontrole zdravotních rizik piva. Předložená studie se proto zabývá těmito méně známými sloučeninami, zejména strukturou molekul a jejich přirozeným výskytem v pivu i sladu. Jelikož je jejich vznik spojován s reakcemi dusitanu se sloučeninami piva a jeho surovin, byl vzorek piva paralelně ošetřen dusitanem (standardním a izotopickým-<sup>15</sup>N) v kyselém prostředí. Díky izotopickému značení byly vzniklé reakční produkty identifikovány plynovou chromatografií s tandemovou hmotnostní spektrometrií. Tímto přístupem bylo nalezeno a strukturně studováno až 22 neznámých reakčních produktů dusitanu (N-produktů) pomocí hmotnostně spektrometrických fragmentací. Kromě dříve nalezeného *N*-nitrosoprolinu a *N*-nitrosoprolin ethyl esteru, byly nově v pivu charakterizovány: 4-kyanofenol, oxim kyseliny pyrohroznové, 2-methoxy-5-nitrofenol, nitrosoguajakol a 4-nitrosfenol. Několik N-produktů bylo chromatograficky i spektrometricky ve shodě s reakčními produkty dusitanu s tyrosinem nebo kyselinou vanilovou. Většina N-produktů byla detekována i v experimentálně nitrovaném sladu pomocí oxidů dusíku, a vykazovala vysokou extrahovatelnost do mladiny. Získaná chromatografická a hmotnostně spektrometrická data vedla k vývoji specifické metody pro pozorování N-produktů v komerčních pivech a sladech (téměř 200 vzorků). Pozorování relativních odezev a četnosti výskytu N-produktů pomocí vícerozměrných analýz odlišilo důležité N-produkty, jež by mohly být zajímavé pro budoucí výzkum. Například syntéza standardních sloučenin o požadované čistotě by vedla k přesnějšímu stanovení N-produktů v pivu či ke studiu jejich možných zdravotních účincích na spotřebitele.