

# Abstrakt

Univerzita Karlova

Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra analytické chemie

Kandidát: Filip Bařinka

Školitel: PharmDr. Pavel Jáč, Ph.D.

Konzultant: Mgr. Dmytro Kosolapov

Název diplomové práce: Optimalizace vybraných parametrů CE-MS metody pro analýzu doplňků stravy s obsahem boswellových kyselin.

Cílem této práce bylo optimalizovat vybrané parametry existující CE-MS metody pro analýzu boswellových kyselin, hlavních biologicky aktivních obsahových látek rostlin rodu *Boswellia*. Boswellové kyseliny, resp. extrakt z *Boswellia serrata* je oblíbeným léčivem rostlinného původu s protizánětlivým a antirevmatickým účinkem, vyskytující se na českém trhu v podobě doplňků stravy, pro které je metoda vyvíjena. Metoda dále cílí na přítomnost látek ze skupiny nesteroidních antiflogistik (NSAID), jakožto potenciálních adulterantů těchto doplňků stravy, jelikož se svým terapeutickým účinkem překrývají s boswellovými kyselinami. Separace probíhala v základním elektrolytu o složení 40 mmol/L octan amonný (pH 8.5), methanol a acetonitril (5:1:4, v/v/v). Kapilární elektroforéza byla spojena s MS pomocí rozhraní s přídatnou kapalinou. Hmotnostní spektrometr byl vybaven iontovým zdrojem Agilent JetStream a trojitým kvadrupólem pro cílenou analýzu v módu „selected reaction monitoring“ (SRM).

V této diplomové práci bylo optimalizováno nastavení parametrů iontového zdroje za pomoci plánování experimentů (DoE). DoE proběhl ve dvou fázích. Screening byl proveden pomocí frakčního faktoriálního designu, během kterého byly vybrány 4 parametry (napětí na ESI kapiláře, napětí na trysce /nozzle voltage/, napětí na vysokotlaké a nízkotlaké nálevce), které měly nejsignifikantnější vliv na ionizaci analytů, jejichž nastavení bylo dále optimalizováno pomocí centrálního kompozitního designu. V dalším kroku byly porovnány dva postupy pro extrakci boswellových kyselin z doplňků stravy. Následně byly provedeny experimenty, jež měly za cíl studovat vliv dalších faktorů ovlivňujících opakovatelnost a citlivost metody s cílem dosáhnout co nejnižších hodnot RSD korigované plochy při zachování či zvýšení citlivosti. Optimalizováno bylo složení přídatné kapaliny, její průtok, nebulizační tlak, doba a způsob nástřiku vzorku. Finální metodou byly analyzovány vybrané doplňky stravy s obsahem extraktu z *Boswellia serrata*. Z výsledných SRM záznamů byl jasně patrný kvantitativní rozdíl v zastoupení jednotlivých boswellových kyselin v různých doplňcích stravy ukazující potenciál této metody pro kontrolu jakosti těchto produktů. Žádný z adulterantů ze skupiny NSAID, jejichž SRM přechody byly zahrnuty v CE-MS metodě, nebyly v analyzovaných doplňcích stravy identifikovány.