

STRESZCZENIE

Rozprawa doktorska dotyczy wpływu mechanizmów jonizacji analitów na czułość detekcji w trybie ujemnym spektrometrii ruchliwości jonów. Celem pracy było prowadzenie badań nad wyjaśnieniem procesów prowadzących do tworzenia jonów ujemnych w IMS, a także nad optymalizacją parametrów detektorów pracujących w tym trybie.

Główną część pracy stanowią badania przeprowadzone za pomocą DT IMS w trybie ujemnym dla różnych analitów. Badania wykonano z użyciem dwóch gazów nośnych: powietrza i azotu. Umożliwiło to porównanie jonizacji analitów w trybie reakcji jonowo-cząsteczkowych oraz poprzez wychwyty elektronów. Identyfikację niektórych produktów jonowych obserwowanych w widmach czasów dryftu zmierzonych za pomocą DT IMS przeprowadzono z wykorzystaniem układu LC-MS ze źródłem jonizacji chemicznej. W badaniach prowadzonych za pomocą DT IMS określono wpływ domieszek tlenu i wody na efektywność detekcji.

Część pracy dotyczy zagadnień aparaturowych związanych z trybem ujemnym IMS. Przeprowadzone badania wykazały, że DT IMS współpracujący z typowymi układami elektronicznymi może spełniać rolę detektora wychwyty elektronów. Dokonano również porównania efektywności jonizacji wybranych związków organicznych z użyciem różnych detektorów (DT IMS, DMS i ECD), pracujących w trybie wychwyty elektronów. Określono w ten sposób jaki wpływ na przebieg jonizacji ma budowa reaktora jonowego i wartość występującego w nim pola elektrycznego. Bardzo interesujące wyniki uzyskano podczas pomiarów, w których detektor DT IMS wykorzystano do wyznaczenia parametrów kinetycznych wychwyty elektronów w eksperymencie prowadzonym metodą SWARM. Wykazano, że w prosty sposób można uzyskać istotne dane o efektywności procesu wychwyty elektronów.

ABSTRACT

The doctoral dissertation concerns the impact of ionization mechanisms of analytes on detection sensitivity in negative mode of ion mobility spectrometry. The goal of this work was to investigate the processes leading to the formation of negative ions in IMS, as well as to optimize the parameters of detectors operating in negative mode. As part of the work, three main experimental tasks were performed.

The main part of the work is research conducted for selected analytes using DT IMS in negative mode of operation. The tests were carried out using two carrier gases: air and nitrogen. This allowed to compare the ionization of analytes in the ion-molecule reactions mode with ionization in electron capture mode. The identification of product ions, observed in drift time spectra measured with DT IMS, was made using LC-MS system with chemical ionization source. In studies performed using DT IMS, the effect of oxygen and water admixtures on the detection efficiency was determined.

Part of the work concerns apparatus issues related to the negative mode of IMS. Performed tests showed that DT IMS cooperating with typical electronic systems can work as an electron capture detector. The ionization efficiency of selected organic compounds was compared using different detectors (DT IMS, DMS and ECD) operating in electron capture mode. This allowed to determine the influence of the ion reactor structure and the value of the electric field on the ionization process. Very interesting results were obtained during measurements in which the DT IMS detector was used to calculate the kinetic parameters of electron capture in the SWARM experiment. It has been shown that important data on the efficiency of the electron capture process can be obtained in a simple way.