

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Chemie

Fachgebiet: Analytische Chemie

Betreuer: Prof. Dr. Ralf Zimmermann

Dipl. -Leb. Chem. Beate Gruber

(e-mail: Beate.Grubert@web.de)

Development and optimization of non- and minimal-invasive methods for the monitoring of endogenous as well as exogenous volatile or semi-volatile organic compounds in body fluids and breath

Im Rahmen dieser Arbeit wurde Atemgas während eines Glukosetests untersucht mittels PTR-QMS sowie simultaner off-line Needle Trap Mikroextraktion und umfassender zwei-dimensionaler Gaschromatographie (GCxGC) TOFMS. Ergänzend wurde die vakuum-ultraviolett Absorptionsspektroskopie erstmalig mit GCxGC gekoppelt und hinsichtlich stark polarer flüchtiger organischer Verbindungen evaluiert. Die aufgrund der Glukosegabe emittierten Atemgasmetabolite wurden zeitlich aufgelöst analysiert und konnten daraufhin als kurzkettige Alkohole und Fettsäuren identifiziert werden. Sie stehen möglicherweise im Zusammenhang mit einem abnormalen Glukosestoffwechsel. Darüber hinaus wurde eine hochempfindliche und minimal-invasive Methode etabliert, welche auf thermischer Extraktion und Gaschromatographie gekoppelt mit Massenspektrometrie für die Untersuchung von Phenanthrene in 1 μ l Kapillarblut basiert. Die evaluierte Methode wurde erfolgreich auf die Überwachung der Phenanthrenekonzentration im Blut angewandt. Die vorgestellte Arbeit präsentiert damit erstmalig die Pharmakokinetik von nicht verstoffwechselten polyaromatischen Kohlenwasserstoffen.

Within this work, breath gas analysis was carried out during a glucose challenge by simultaneous real-time PTR-QMS and off-line needle trap micro extraction combined with comprehensive two-dimensional gas chromatography (GCxGC) coupled to TOFMS. Complementary vacuum ultraviolet absorption spectroscopy was coupled to GCxGC the first time and evaluated for highly polar volatile organic compounds. Glucose challenge responsive breath metabolites could be monitored and identified as small n-alkanols and short chain fatty acids, which might be related to an abnormal glucose metabolism. Besides, a highly sensitive and less invasive method for phenanthrene analysis in 1 μ L capillary blood was established using thermal extraction in combination with gas chromatography mass spectrometry. The evaluated method was applied successfully to the monitoring of phenanthrene blood levels. Thus, this work represents pharmacokinetics of unmetabolized polyaromatic hydrocarbons in human for the first time.