

ABSTRAKT

Lipidomika je rychle se rozšiřující vědní obor, který zaznamenal v posledních letech vzrůstající pozornost a to zejména díky zvyšujícímu se vědomí o stěžejních rolích lipidů v biologických systémech. Hlavním cílem lipidomiky je systematické studium všech lipidů, zahrnuje popis jejich struktury, biologických funkcí v buňce a rovněž popis interakcí lipidů s dalšími molekulami. Spojení pokročilých analytických metod, jako je extrakce, chromatografie a hmotnostní spektrometrie, umožňuje efektivním způsobem studovat všechny aspekty lipidomiky. Předkládaná dizertační práce je komentovaným souborem ke dvěma publikovaným pracím a zabývá se využitím separačních technik a hmotnostní spektrometrie pro detekci a strukturní charakterizaci nových lipidových tříd v novorozeneckém mázku.

V prvním případě bude popsáno použití techniky bezvodé kapalinové chromatografie na reverzní fázi ve spojení s tandemovou hmotnostní spektrometrií s chemickou ionizací za atmosférického tlaku (LC-APCI-MS²) pro strukturní charakterizaci cholesterol esterů ω -(*O*-acyl)-hydroxy mastných kyselin (Chl- ω OAHFAs) v novorozeneckém mázku. Pro účel izolace neutrálních Chl- ω OAHFAs byla vyvinuta metoda adsorpční tenkovrstvé chromatografie. Obecná struktura Chl- ω OAHFAs byla odvozena na základě analýzy jejich produktů transesterifikace a derivatizace. Ke zjištění struktury jednotlivých molekulových druhů byla optimalizována hmotnostně spektrometrická metoda s využitím cílené termální degradace protonovaných molekul a data-dependentní fragmentace vzniklých produktů. Tímto způsobem bylo identifikováno a kvantifikováno více než 300 molekulových druhů Chl- ω OAHFAs.

V druhém případě půjde o identifikaci a popis strukturně příbuzné podskupiny lipidů, a to (*O*-acyl)-hydroxy mastných kyselin (OAHFAs). OAHFAs byly izolovány

z novorozeneckého mázku pomocí 2-krokové tenkovrstvé chromatografie. Pro jejich detekci a identifikaci byla optimalizována metoda kapalinové chromatografie a tandemové hmotnostní spektrometrie s elektrosprej ionizací (LC-ESI-MS²). Touto technikou bylo možné identifikovat a stanovit více než 400 molekulových druhů. Chl- ω OAHFAs a ω OAHFAs byly již dříve identifikovány například v lidském meibu či kůži. Během analýzy ω OAHFAs v novorozeneckém mázku byla odhalena přítomnost α -izomerů OAHFAs. Intaktní α OAHFAs nebyly doposud detekovány v žádném biologickém materiálu.

