

## ABSTRAKT (CZ)

Tato disertační práce shrnuje použití moderních hmotnostně-spektrometrických metod pro strukturní identifikaci mastných kyselin a estolidů triacylglycerolů (TG-EST) a jejich následnou charakterizaci v lipidomu novorozeneckého mázku, tj. biofilmu pokrývajícího pokožku lidského plodu během posledního trimestru těhotenství. Novorozenecký mázek je především známý svými antimikrobiálními vlastnostmi a schopností hojení ran a popálenin.

První část disertační práce se zaměřuje na rozmanitost mastných kyselin v lipidomu novorozeneckého mázku. Tyto kyseliny tvoří strukturní podjednotky komplexních lipidů, např. hojně zastoupených triacylglycerolů a voskových esterů. Studium mastných kyselin a jejich strukturních rysů bylo možné v této práci získat cenné poznatky o strukturní variabilitě celého lipidomu novorozeneckého mázku. Bez plného pochopení struktury těchto klíčových podjednotek by bylo v budoucnu nemožné dokončit analýzu tohoto lipidomu. Mastné kyseliny byly v této práci charakterizovány pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC) a pokročilých metod hmotnostní spektrometrie, a to fotodisociace ultrafialovým zářením (UVPD) a disociace vyvolané ozonem (OzID). Spojení HPLC a hmotnostní spektrometrie (HPLC-MS) poskytlo jednoznačné informace o polohách a geometrii dvojných vazeb a methylových větvení v acylových řetězcích mastných kyselin. Byly objeveny nové mastné kyseliny, které dosud nebyly popsány v existujících databázích lipidů, např. LIPID MAPS®.

Druhá část práce se soustředí na vývoj a optimalizaci hmotnostně-spektrometrických metod založených na kolizně indukované disociaci (CID), kolizní disociaci s vyšší energií (HCD), OzID a UVPD pro strukturní analýzu TG-EST. Molekuly TG-EST jsou známé pro své protizánětlivé účinky. Byla studována fragmentace amonných, lithných a sodných molekulových aduktů strukturních izomerů TG-EST. Výběrem molekulového aduktu a aktivační metody bylo možné odlišit jednotlivé strukturní izomery TG-EST. Detailní charakterizace složení mastných kyselin a polohové izomerie estolidových podjednotek bylo dosaženo fragmentací lithných aduktů TG-EST. Na základě těchto výsledků byla optimalizována HPLC-MS metoda pro separaci standardů TG-EST a TG-EST v novorozeneckém mázku.