



## Posudek oponenta disertační práce

Název práce: **Vývoj hmotnostně-spektrometrických metod pro strukturní analýzu mastných kyselin a estolidů**

Jméno uchazeče: Mgr. Lukáš Cudlman

Studijní program: Analytická chemie

Předložená disertační práce s názvem: „Vývoj hmotnostně-spektrometrických metod pro strukturní analýzu mastných kyselin a estolidů“ se zabývá použitím hmotnostně-spektrometrických metod pro strukturní identifikaci mastných kyselin a estolidů triacylglycerolů a jejich následnou charakterizaci v lipidomu novorozeneckého mázku. Lipidomika je beze sporu aktuální výzkumné téma velkého významu a společenského přínosu.

Disertační práce je založena na dvou článcích publikovaných v odborných časopisech a dvou článcích, které jsou ve fázi přípravy. V první části práce autor vhodným způsobem uvádí čtenáře do problematiky analýzy lipidů. Poskytuje informace o jednotlivých třídách lipidů a jejich strukturní rozmanitosti a následně se zaměřuje na způsoby jejich analýzy, a to hlavně na kapalinovou chromatografii a hmotností spektrometrii. V závěru této části práce autor pojednává o novorozeneckém mázku. Následuje experimentální část práce, kde autor podrobně shrnuje použité chemikálie, instrumentaci a jednotlivé analytické postupy a metody. Stěžejní částí práce je kapitola 4 Výsledky a diskuze. V první části výsledků se autor zaměřuje na strukturní analýzu mastných kyselin v novorozeneckém mázku pomocí HPLC-UVPD a HPLC-OzID. Autor úspěšně vyvinul a optimalizoval metody HPLC-MS pro citlivou detekci a komplexní charakterizaci mastných kyselin v novorozeneckém mázku. Použití derivatizace 4-I-AMPP<sup>+</sup> významně zlepšilo citlivost detekce a umožnilo identifikaci více než 200 mastných kyselin, včetně neobvyklých struktur jako jsou kyseliny "non-methylene-interrupted" a

**Přírodovědecká fakulta UK**

RNDr. Petr Kozlík, Ph.D.

**Adresa:** Hlavova 8, 128 00 Praha 2

**telefon:** 221 951 218

**e-mail:** kozlik@natur.cuni.cz

Katedra analytické chemie

**ičo:** 00216208, **dič:** CZ00216208



nenасыčené a současně rozvětvené mastné kyseliny. Autor ve své práci demonstruje potenciál UVPD v určení methylového větvení pro methylem-větvené nenasycené kyseliny a OzID pro potvrzení poloh dvojných vazeb. V druhé části výsledků se autor zaměřuje na strukturní analýzu estolidů triacylglycerolů. Byly provedeny detailní MS<sup>n</sup> experimenty pěti standardech TG-EST, z nichž tři jsou estolidově-větvené izomery a dva *sn*-izomery. Tandemová hmotnostní spektrometrie [M + NH<sub>4</sub>]<sup>+</sup>, [M + Li]<sup>+</sup> a [M + Na]<sup>+</sup> poskytla podrobné informace o struktuře izomerů TG-EST, zejména o poloze estolidového větvení a *sn*-poloze FAHFA podjednotky na glycerolu. Výsledky ukázaly, že [M + Li]<sup>+</sup> adukty byly nejvhodnější pro identifikaci struktur TG-EST, a to díky poskytovaným informacím o mastných kyselinách v podjednotce FAHFA a lithných iontech HFA.

Celkově práce obsahuje nové, relevantní a prakticky významné poznatky. Ve všech případech jsou výsledky prezentovány přehledně a vhodnou formou. Diskuse a vyvozené závěry jsou podpořeny patřičnými experimentálními daty, která jsou smysluplně interpretována. Práce je psána čtivě, srozumitelně, neobsahuje téměř žádné překlepy, gramatické ani pravopisné chyby. Po formální stránce je práce na velmi vysoké úrovni.

Otázky do diskuse:

- HPLC-UVPD analýza derivátů mastných kyselin trvala 180 minut. Co bylo důvodem k takto „dlouhé“ době analýzy?
- Existují sofistikované lipidomické softwary schopné interpretovat CID, UVPD a OzID hmotnostní spektra? Jaké s nimi má autor zkušenosti?
- Práce se zabývá strukturní analýzou mastných kyselin a estolidů. Z pohledu kvantitativní lipidomické analýzy – jak se běžně provádí kvantitativní analýza studovaných látek? Existují izotopicky značené standardy cílových mastných kyselin a estolidů? Jaký způsob disociace by si autor pro kvantitativní analýzu vybral a proč?

**Přírodovědecká fakulta UK**

RNDr. Petr Kozlík, Ph.D.

**Adresa:** Hlavova 8, 128 00 Praha 2

**telefon:** 221 951 218

**e-mail:** kozlik@natur.cuni.cz

Katedra analytické chemie

**ičo:** 00216208, **dič:** CZ00216208



Závěrem konstatuji, že práce autora v uvedené oblasti přinesla nové poznatky a informace a je z odborného hlediska hodnotná. Lze shrnout, že uchazeč prokázal připravenost k samostatné vědecké činnosti, a proto jeho disertační práci **doporučuji přijmout k obhajobě a rovněž doporučuji, aby se stala podkladem pro udělení titulu Ph.D.**

Datum a místo vypracování posudku: 5.3.2024 ve Starém Kolíně

Jméno a příjmení, podpis oponenta: RNDr. Petr Kozlík, Ph.D.

**Přírodovědecká fakulta UK**

RNDr. Petr Kozlík, Ph.D.