

Obsah a rozsah státní závěrečné zkoušky:

Povinné předměty:

KBF/SZZM5

1. Kvantová fyzika

1. Kvantové představy ve fyzice. Experimenty, které nelze vysvětlit klasicky. Postuláty kvantové mechaniky. Matematický aparát nerelativistické kvantové mechaniky (vlnová funkce, operátory fyzikálních veličin, Schrödingerova rovnice, spin mikročástice, Pauliho rovnice).

2. Základní pojmy kvantové mechaniky. Vlnová funkce, Schroedingerova rovnice, stacionární, nestacionární stavy. Operátory fyzikálních veličin. Základní představy kvantové teorie systémů mnoha částic, symetrické, antisymetrické vlnové funkce, úplné vlnové funkce. Základy teorie reprezentací.

3. Elementární kvantová teorie atomů se dvěma elektrony. Atom helia, základní a excitované stavy. Parahelium, orthohelium.

4. Elementární kvantová teorie atomů s více než dvěma elektrony. Hartreeho metoda selfkonzistentního pole.

5. Základní aproximace v teorii chemické vazby. Bornova - Oppenheimerova aproximace, adiabatická aproximace. Separace vibračních a rotačních stupňů volnosti dvouatomové molekuly.

6. Jednoelektronová aproximace. Hartree - Fockovy rovnice pro řešení jednoelektronových funkcí a jednoelektronových energií. Molekuly jako systémy s uzavřenými slupkami, Fockův operátor.

7. Aproximace n-elektronové funkce molekuly. Metoda VB, metoda MO LCAO. Volba báze v metodě MO LCAO, orbitály VTO, STO, GTO, jejich vlastnosti. Korelační problém, metoda konfigurační interakce CI.

8. Kvantová teorie chemické vazby. Kvantitativní popis kovalentní vazby v homonukleárních dvouatomových molekulách. Řešení molekuly vodíku metodami VB a MO LCAO.

9. Kvalitativní popis chemické vazby. Atomové a molekulové orbitály v kvalitativním popisu chemické vazby, jejich zobrazení a charakteristiky. Hybridní atomové orbitály. Konstrukce molekulových orbitalů, překryvy atomových orbitalů. Charakteristiky homonukleárních dvouatomových molekul.

10. Kovalentní vazba v heteronukleárních dvouatomových molekulách. Iontová vazba. Víceatomové molekuly, lokalizované a nelokalizované molekulové orbitály víceatomových molekul. Hybridizace v teorii chemické vazby.

11. Přehled výpočetních metod v kvantové teorii chemické vazby. Metody "ab initio", semiempirické a empirické metody, příklady těchto metod. Metody uvažující valenční elektrony, - elektronové přiblížení.

KBF/SZZM6

2. Experimentální metody biofyziky

1. Klasická teorie interakce optického záření a hmoty, důsledky pro spektroskopie. Obecný význam Kramers-Kronigových relací. Kvantová teorie interakce optického záření a hmoty. Výběrová pravidla ve spektroskopiích. Fermiho zlaté pravidlo.
2. Kvantově-mechanický popis stavů molekul (adiabatická a Born-Oppenheimerova aproximace), rozdělení spektroskopií. Teorie rotačních a vibračních spekter. Klasická a kvantová teorie malých vibrací. Normální vibrace. Teorie elektronově -vibračních absorpčních a luminiscenčních spekter. Franck-Condonův princip. Molekulové orbitaly a jejich projev ve spektrech.
3. Teorie symetrie a vliv symetrie na spektra molekul. Vztah mezi absorpčními a rozptylovými spektroskopii. Podstata disperzních a FT metod. Reálná spektra, rozšíření spektrálních čar, vliv přístrojové funkce. Využití teorie autokorelačních funkcí ve spektroskopiích rozptylů a fluorescence.
4. Teoretická podstata magnetických rezonančních spektroskopií, Blochovy rovnice, základy klasické a kvantové teorie, pravidla štěpení čar, relaxační časy. Rozdíl mezi NMR a EPR, anizotropní jevy. Teoretické základy Mössbauerovy spektroskopie.
5. Nukleární magnetická rezonance (NMR). Teorie NMR, stacionární, časově-proměnné a pulzní magnetické pole, klasická, kvantová a fenomenologická teorie. Spektra NMR, počet, intenzita signálů a poloha signálů, štěpení čar.
6. Metody NMR, jednorozměrá NMR, ^1H -NMR, ^{13}C -NMR, vícerozměrá NMR (homonukleární, heteronukleární), NMR zobrazování. Použití NMR v biologii a medicíně.
7. Elektronová paramagnetická rezonance (EPR). Teorie EPR, rozštěpení energetických hladin, podmínka EPR rezonance, volné radikály, přechodné kovy, spin-orbitální a spin-spinové interakce, přehled interakcí měřených pomocí EPR, porovnání EPR a NMR. Spektra EPR, poloha píku, intenzita píku, šířka linie.
8. Metody EPR, kontinuální EPR (high-field EPR, EPR spin-trapping, EPR labeling, cw ENDOR/ELDOR), pulzní EPR (FT-EPR, pulzní ENDOR/ELDOR, ESEEM), porovnání cw/pulzní ENDOR a ESEEM, EPR zobrazování. Použití EPR v biologii a medicíně.
9. Mössbauerova spektroskopie. Teorie Mössbauerova jevu, klasická teorie Mössbauerova jevu, emise a absorpce záření gama volným a vázaným jádrem. Mössbauerova spektra, hyperjemná interakce (monopolní, kvadrupólová, magnetická dipólová), kvalitativní a kvantitativní analýza. Metody Mössbauerovy spektroskopie. Použití Mössbauerovy spektroskopie v biologii.
10. Experimentální uspořádání v rezonančních spektroskopiích. Základní části NMR spektrometru, kontinuální NMR spektrometr, pulzní NMR spektrometr. Základní části EPR spektrometru, kryogenní technika, komerčně dostupné EPR spektrometry. Mössbauerovy spektrometry.

11. Zásady práce s biologickým materiálem. Homogenizace tkání a extrakce obsahu buněk. Extrakční a precipitační metody. Centrifugační metody. Preparativní a analytická centrifugace, centrifugace v hustotním gradientu. Dialýza a její provedení.

12. Chromatografické metody. Adsorpční, iontoměničová, gelová a afinitní chromatografie. HPLC a perfúzní chromatografie. Chromatofokusace.

13. Elektromigrační metody. Gelová elektroforéza. Isoelektrická fokusace a 2D elektroforéza. Blotting. Kapilární elektroforéza.

14. Metody studia proteinů a DNA. Stanovení koncentrace proteinů a DNA. Sekvenční analýza. Peptidové mapování, mapování DNA restrikčními endonukleasami. Hmotnostní spektrometrie proteinů, fingerprinting peptidových hmotností, de novo sekvenování. Studium postranlačních modifikací proteinů, chemické modifikace proteinů, proteiny jako biomarkery v medicíně.

15. Imunochemické metody. Polyklonální a monoklonální protilátky. Imunodifúze a imunoelektroforéza. ELISA, imunoblotting. Průtoková cytometrie.

KBF/SZZM7

3. Molekulární biologie

1. Základy genetiky. Uložení genetické informace, centrální dogma molekulární biologie, chromozómy, mitóza, meióza, gen, alela, genotyp a fenotyp, struktura DNA, superhelikální struktura v prokaryotech a eukaryotech.

2. Replikace DNA. Princip replikace, uvolnění vláken, vytvoření primeru, výstavba vláken, vedoucí vlákno, opožďující se vlákno, odštěpení a náhrada primeru, spojení Okazakiho fragmentů, rychlost replikace u prokaryotních a eukaryotních organismů, telomery, opravy chyb při replikaci.

3. Transkripce. Princip transkripce, iniciace, promotor, σ -faktor, elongace, terminace, σ -faktor, regulace transkripce u prokaryot, aktivátory, represory, operony, regulace transkripce u eukaryot, introny, exony, splicing.

4. Translace. Kodony, vliv mutace, inserce, delece, transferová RNA, její struktura, ribosomy, fáze translace, nabití tRNA, iniciace, elongace, terminace, posttranslační modifikace, transport proteinů do organel, rozpoznávací sekvence.

5. Reverzní transkripce. Princip reverzní transkripce, reverzní transkriptáza, technika RT-PCR, poly-A konec, syntéza komplementární DNA, význam reverzní transkripce pro vyhledávání genů a při diagnostice RNA virů.

6. Sekvence DNA. Metody sekvenování DNA, metoda chemického štěpení, označení vláken, sestavení sekvence po chemickém štěpení, metoda terminace řetězce DNA, detekce analyzované sekvence, sekvenace dlouhých úseků DNA.

7. Genové manipulace. Fragmentace DNA, restrikční endonukleázy, analýza DNA, elektroforéza, southern-blotting, denaturace DNA, hybridizace DNA se sondou, využití hybridizačních technik.

8. Technika PCR. Princip techniky polymerázové řetězové reakce, denaturace, nasednutí primerů (annealing), elongace, reagentie pro PCR, praktické možnosti využití techniky PCR, možnosti vnesení mutace do genu.

9. Klonování DNA. Klonovací vektory, vkládání genetické informace do hostitelských organismů, plasmidy, bakteriofágy, kosmidy, selekce hostitelských organismů, DNA knihovny, DNA čipy.

10. Využití mikroorganismů v molekulární biologii. Mikroorganismy využívané v molekulární biologii, zmnožení DNA, heterologní exprese proteinů rozpustných a membránových, tvorba a využití fúzních proteinů.

Volitelné předměty (student si vybere jeden ze dvou)

KBF/SZZM8

4.A. Strukturní biologie

1. Aminokyseliny a peptidy. Fyzikální vlastnosti aminokyselin (velikost, hydrofobicita, pK_A). Přírodní peptidy: hormony, antibiotika, jedy a toxiny. Proteiny. Periodické sekundární struktury proteinů: alfa-helix a skládaný list. Terciární a kvartérní struktury proteinů. Allosterie.

2. Metody stanovení celkových proteinů. Metody stanovení M_r proteinů. Struktura a funkce bílkovin. Sekvencování peptidů a problematika peptidových syntéz. Metody pro stanovení sekundární struktury proteinů. Metody pro stanovení terciární struktury proteinů. Interakce bílkovin s léčivými, inhibitory a cizorodými látkami; navrhování a modelování nových léčiv.

3. Enzymy. Specificita a vztah k reakční rovnováze a aktivační energii reakcí. Podmínky enzymové aktivity (pH, teplota, koncentrace solí). Enzymová kinetika. Rovnice Michaelise a Mentenové, význam K_m , jednotky a metody stanovení enzymové aktivity. Aktivace enzymů. Reversibilní a ireversibilní inhibice. Typy reversibilních inhibicí. Allosterické enzymy. Mechanismus působení enzymů. Aktivní místo enzymu. Koenzymy, kofaktory, kosubstráty a prostetické skupiny.

4. Nukleové kyseliny. Struktura a funkce basí, párů basí a oligomerů nukleových kyselin; struktura a funkce DNA a komplexů DNA s léčivými a cizorodými látkami, vznik a typy mutací. Vyšší organizace DNA. Chromosomy, nukleosomy a chromatin.

5. Určení sekvence nukleových kyselin (endonukleázy, exonukleázy, restriktázy, chemická /Maxam-Gilbertova/ metoda, terminační /Sangerova/ metoda). Metody studia reakcí mutagenů, kancerogenů a cytostatik s DNA; vazba na DNA, detekce a charakterizace aduktů DNA-karcinogen, sekvenční preference vazby, tvorba meziřetězcových můstků, změny konformace a stability DNA, reakce s buněčnými proteiny a opravy poškozené DNA, metody a postupy pro určení mutagenity chemických látek.

6. Spektroskopické a biochemické metody ve strukturní biologii. Metody určování velikosti a tvaru biomakromolekul. Interakce biomakromolekul s ligandy. Studium rychlých reakcí.

7. Biologické membrány. Struktura a modely buněčných membrán. Fyzikální vlastnosti membrán (fázové přechody, pohyblivost). Transport látek přes biologickou membránu (aktivní a pasivní).

8. Původ a popis nekovalentních interakcí, srovnání kovalentních a nekovalentních interakcí. Experimentální detekce nekovalentních interakcí. Kvantově-chemické a statisticko-termodynamické určení nekovalentních interakcí; statický a dynamický pohled. Počítačové experimenty: metody molekulové dynamiky a Monte Carlo.

9. Energie, enthalpie, entropie, volná energie; hydrofobní interakce. Vodíkové vazby; nepravé vodíkové vazby; dvouvodíkové vazby. Mezimolekulové komplexy v plynné fázi. Úloha kapalných fází a struktura nekovalentních komplexů v kapalném prostředí. Nevalentní interakce v biomolekulách.

10. HF metody. Adiabatická a Bornova-Oppenheimerova aproximace, SCF teorie, Slaterův determinant, Koopmansův teorém, báze funkce (basis set). RHF a UHF metody, techniky SCF, semiempirické metody.

11. Metody zahrnující elektronovou korelaci, pojem elektronové korelace, excitované Slaterovy determinanty, konfigurační interakce - CI, poruchové metody - MP, metoda vázaných klastrů - CC

12. DFT metody. Metody lokální hustoty, gradientově korigované metody, hybridní metody. Analýza vlnové funkce populační analýzy, přirozené orbitály NO a NBO analýza. Hyperplocha potenciální energie a výpočet vlastností molekul, pojem PES, identifikace minim, interakce s externími poli, výpočet IR spekter. Srovnání kvality metod srovnání ab-initio metod a DFT metod z hlediska konvergence geometrie, výpočtu IR spekter a dipólových momentů.

13. Výpočty termodynamických funkcí na základě kvantově mechanických výpočtů. Solvatace a solvatační modely, kontinuální solvatační modely a model supermolekuly. Aplikace (slabé mezimolekulové interakce, nepravá vodíková vazba, vliv solvatace na konformační chování).

KBF/SZZM9

4.B. Fyziologie

1. Elektrické vlastnosti buňky. Membránový potenciál, Nernstova, Goldmanova a Donanova rovnice. Kabelová rovnice. Fluktuční analýza. Hodgkin-Huxleyův model pro akční potenciál.

2. Nervová buňka a synapse. Funkční anatomie srdce a převodní soustava srdce. Akční potenciál nervových buněk a srdečního svalu, jejich fáze a změny v membráně během akčního potenciálu. Princip EPP, MEPP, EPSP, IPSP. EKG a EEG.

3. Typy transportu iontů přes membránu. Struktura a funkce iontových kanálů řízených napětím a ligandem. Struktura a funkce konexonů a elektrotonický přenos. Elektrické vlastnosti rostlin.

4. Buněčné dýchání a fosforylace. Mitochondrie a Krebsův cyklus. Substrátová, oxidativní a fotosyntetická fosforylace. Přenos elektronů ve vnitřní mitochondriální membráně. Chemiosmotická hypotéza. ATP-syntáza.

5. Smyslové orgány. Princip detekce světla a zvuku. Struktura oka a ucha. Zrakové buňky a rhodopsin. Cochlea a Cortiho orgán, vnitřní a vnější vlasové buňky. Mechanismus funkce hmatu, čichu a chuti.

6. Svaly a cytoskelet. Druhy a struktura svalů a svalové buňky. Molekulární mechanismus svalové kontrakce. Energetika svalové činnosti. Struktura a funkce cytoskeletu. Mikrotubuly, mikrofilamenta, intermediární filamenta, membránový a jaderný skelet.

7. Fyziologie rostlinné buňky, fotosyntéza. Struktura rostlinné buňky, buněčná stěna, membránový transport. Fotosyntéza - primární a sekundární děje. Organizace fotosyntetického aparátu. Calvinův cyklus. C4 - rostliny. CAM - rostliny. Fotorespirace. Floémový transport.

8. Růst a vývoj rostlin. Regulace světlem. Fytochrom. Růstové regulátory, mechanismus, přenos. Auxiny. Cytokininy. Gibereliny. Brassinosteroidy. Kyselina abscisová. Senescence. Stresová fyziologie rostlin. Charakteristika, fáze stresu, vliv stresorů, aklimace, faktory. Infekce hostitele, etapy. Imunita rostliny a obranné reakce.

9. Vodní režim rostlin. Vodní potenciál rostlin, teorie. Osmotický a tlakový potenciál. Relativní obsah vody (RWC). Psychrometrická metoda, metoda tlakové bomby. Měření transpiračního proudu. Tlakové metody měření turgoru. Průduchy a vodivost průduchů, porometrie. Využití spektra odrazivosti v infračervené oblasti.

10. Výměna plynů mezi rostlinou a atmosférou. Gazometrické měření rychlosti fotosyntézy a transpirace. Teorie světelných a CO₂ křivek fotosyntézy, kinetika a aktivace enzymu Rubisco. Kompenzační a saturační body. Stanovení rychlosti přenosu elektronů. Aparatury na měření rychlosti asimilace CO₂, IRGA, otevřené a uzavřené systémy. Měření vývinu kyslíku. Clarkova elektroda.