

MASARYKOVA UNIVERZITA  
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA



---

---

# ŽÁDOST O AKREDITACI

*Navazujícího magisterského studijního programu*

**Biochemie**

*Obor*

**Biomolekulární chemie**

---

---

Brno, říjen 2011

# OBSAH

OBSAH.....	1
A – Žádost o akreditaci / rozšíření nebo prodloužení doby platnosti akreditace bakalářského stud. programu.....	3
Obor: Biomolekulární chemie.....	4
B – Charakteristika studijního programu a jeho oborů, pokud se na obory člení.....	4
C – Pravidla pro vytváření studijních plánů SP (oboru) a návrh témat prací.....	6
C1 – Doporučený studijní plán.....	16
E – Personální zabezpečení studijního programu – souhrnné údaje.....	20
F – Související vědecká, výzkumná, vývojová, umělecká a další tvůrčí činnost.....	21
I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy.....	22
D – Charakteristika studijních předmětů.....	23
Bi5220 Imunologie.....	23
Bi7201 Základy genomiky.....	23
Bi8090 Genové inženýrství.....	24
Bi8202 Základy proteomiky.....	25
Bi8202c Základy proteomiky - cvičení.....	25
Bi8980 Příprava a charakterizace proteinů I - Expresa a purifikace.....	26
CA340 Diplomová práce IV (BC).....	26
CB060 Seminář NCBR.....	27
CB070 Proteinová krystalografie.....	27
CB080 Proteinová krystalografie - seminář.....	28
CC060 Seminář NCBR.....	28
C2110 Operační systém UNIX a základy programování.....	28
C2135 Bioinformatika v praxi.....	29
C3200 Chemická literatura.....	29
C4300 Chemie životního prostředí I - Environmentální procesy.....	30
C4310 Chemie životního prostředí II - Zdroje znečištění, složky prostředí a jejich znečištění - technosféra, atmosféra.....	31
C4840 Metody značení a imobilizace biomolekul.....	32
C5020 Chemická struktura.....	33
C5120 Počítače v chemii a chemometrie.....	34
C5300 Statistická termodynamika.....	34
C5320 Fyzikálně chemické základy NMR.....	35
C5340 Nerovnovážné systémy.....	36
C5850 Biofyzikální chemie I.....	36
C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie.....	37
C6200 Biochemické metody.....	38
C6210 Biotechnologie.....	38
C6260 Metody separace proteinů.....	39
C6310 Symetrie molekul.....	40
C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules.....	40
C6800 Multinukleární NMR spektroskopie.....	41
C6950 Chemická exkurze.....	42
C6960 Odborná praxe.....	42
C7777 Zacházení s chemickými látkami.....	42
C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I.....	43
C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení.....	44
C7830 Kapilární elektroforéza.....	44
C7860 Rostlinná biochemie.....	45
C7870 Biometrika.....	46
C7880 Separční metody II.....	46
C7895 Hmotnostní spektrometrie biomolekul.....	47
C7910 Metody chemického výzkumu.....	48
C7920 Struktura a funkce proteinů.....	49
C7925 Struktura a dynamika nukleových kyselin.....	49
C8140 Bioenergetika.....	50
C8150 Bioenergetika - seminář.....	51
C8160 Enzymologie.....	51
C8170 Enzymologie - seminář.....	52
C8210 Diplomová práce II (BC).....	52

C8800 Rtg strukturní analýza.....	53
C8801 Krystalografie biomakromolekul.....	53
C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II .....	54
C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení.....	55
C8857 Protein Preparation and Characterization III - Protein-Mediated Interaction .....	55
C8857c Protein Preparation and Characterization III - practice.....	55
C8862 Výpočty volných energií - cvičení.....	56
C8863 Výpočty volných energií .....	56
C8950 NMR - Strukturní analýza .....	57
C8951 NMR spektroskopie pevného stavu - základní principy a aplikace v chemii. ....	58
C9085 Protein-RNA interactions .....	59
C9100 Biosenzory.....	60
C9300 Diplomová práce I (BC) .....	60
C9310 Diplomová práce III (BC).....	61
C9920 Úvod do kvantové chemie .....	61
C9930 Metody kvantové chemie .....	61
F5030 Základy kvantové mechaniky .....	62
F5351 Základy molekulární biofyziky .....	63
F8310 Molekulové interakce a jejich úloha v biologii a chemii .....	64
JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška .....	65
XV004 Výzkum a vývoj v praxi .....	66

## A – Žádost o akreditaci / rozšíření nebo prodloužení doby platnosti akreditace bakalářského stud. programu

<b>Vysoká škola</b>	Masarykova univerzita			
<b>Součást vysoké školy</b>	Přírodovědecká fakulta	<b>STUDPROG</b>	<b>st. doba</b>	<b>titul</b>
<b>Název studijního programu</b>	Biochemie		2	Mgr.
<b>Původní název SP</b>	Biochemie	<b>platnost předchozí akreditace</b>	15. 8. 2012	
<b>Typ žádosti</b>	prodloužení akreditace	<b>druh rozšíření</b>		
<b>Typ studijního programu</b>	navazující magisterský		<b>rigorózní řízení</b>	
<b>Forma studia</b>	prezenční		<b>KKOV</b>	
<b>Obor v tomto dokumentu</b>	<b>Biomolekulární chemie – prodloužení akreditace</b>		Ano	1406T004
<b>Obor v jiných dokumentech</b>	Biochemie – prodloužení akreditace		Ano	1406T002
	Analytická biochemie – prodloužení akreditace		Ano	1406T008
<b>Adresa www stránky</b>		<b>jméno a heslo k přístupu na www</b>		
<b>Schváleno VR /UR /AR</b>	VR PřF MU	<b>podpis rektora</b>		<b>datum</b>
<b>Dne</b>	5. 10. 2011			
<b>Kontaktní osoba</b>	Prof. RNDr. Zdeněk Glatz, CSc	<b>e-mail</b>	glatz@chemi.muni.cz	
<b>Garant studijního programu</b>	<a href="#">Prof. RNDr. Zdeněk Glatz, CSc</a>			

## Obor: Biomolekulární chemie

<b>B – Charakteristika studijního programu a jeho oborů, pokud se na obory člení</b>		
Vysoká škola	Masarykova univerzita	
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta	
Název studijního programu	Biochemie	
Název studijního oboru	Biomolekulární chemie	
Údaje o garantovi studijního oboru	Prof. RNDr. Vladimír Sklenář, DrSc <a href="http://www.muni.cz/people/2611">http://www.muni.cz/people/2611</a>	
Zaměření na přípravu k výkonu regulovaného povolání	ne	
<b>Charakteristika studijního oboru (studijního programu)</b>		
Obor Biomolekulární chemie zahrnuje znalosti o stavbě biologicky významných molekul a o vztahu mezi jejich strukturou a funkcí. Součástí oboru je metodika získávání a aplikace poznatků o struktuře a funkci biomolekul.		
<b>Profil absolventa studijního oboru (studijního programu) &amp; cíle studia</b>		
<p>Cílem studijního oboru Biomolekulární chemie je připravit odborníky s vysokou úrovní znalostí z oblasti obecné biochemie, enzymologie, strukturní biologie, molekulární genetiky, proteinového inženýrství a bioinformatiky se zdůrazněním znalostí o struktuře, dynamice a funkci biologicky významných molekul a molekulárních komplexů. Základ tvoří vědomosti z matematiky, fyziky, chemických a biologických disciplin: obecné a anorganické chemie, organické chemie, analytické chemie, fyzikální chemie, strukturní chemie, biochemie, mikrobiologie, molekulární biologie, výpočetní techniky, počítačového zpracování dat a informatiky. Studenti se naučí pracovat s literaturou a výsledky prezentovat písemnou i mluvenou formou a to i v jazyce anglickém. Cílem přípravy je vytvořit teoretický základ pro postgraduální studium, jakož i vybavit studenty praktickými dovednostmi z výše uvedených oblastí pro uplatnění v základním i aplikovaném výzkumu. Na tomto základě jsou rozvíjeny další předměty studijního oboru zaměřené na obecnou biochemii a enzymologii tak, aby absolventi mohli pracovat v široké oblasti profesí, kde je vyžadováno biochemické vzdělání. Zcela zásadní a významnou složku studia tvoří nově se rozvíjející disciplíny jako jsou strukturní biologie, proteinové inženýrství a bioinformatika. Výuka je zaměřena na získání vědomostí o stavbě proteinů, nukleových kyselin a cukrů, popisu jejich základních strukturních charakteristik a poznatků o primární, sekundární a terciární struktuře těchto biomolekul. Nedílnou součástí tvoří i teoretické a praktické vědomosti z krystalografie biopolymerů, NMR studií jejich struktury a dynamických vlastností a poznatků z molekulového modelování, molekulové dynamiky a počítačové chemie a biochemie. Absolventi oboru jsou připraveni pro práci v biochemickém, farmaceutickém, veterinárním a zdravotnickém výzkumu, a to jak s orientací na základní, tak i aplikovaný výzkum a v biotechnologických výrobcích s výše uvedeným zaměřením. Absolventi oboru jsou vybaveni nejen na profesionální působení ve své specializaci, ale také na snadnou adaptaci k případnému působení v jiném oboru. Návazné postgraduální studium ve stejném oboru jim dává možnost perspektivního uplatnění nejen na tuzemském, ale i zahraničním pracovním trhu.</p>		
<b>Charakteristika změn od předchozí akreditace (v případě prodloužení platnosti akreditace)</b>		
K drobným změnám došlo pouze v doporučeném studijním plánu a to v nabídce povinně volitelných a doporučených volitelných předmětů, což souvisí s dalším rozvojem tohoto progresivního oboru. V této souvislosti byly také inovovány požadavky k přijímacímu řízení a státní závěrečné zkoušce.		
<b>Prostorové zabezpečení studijního programu</b>		
Budova ve vlastnictví VŠ	ano	Budova v nájmu – doba platnosti nájmu
		-

**Informační zabezpečení studijního programu**

Informační zdroje jsou zabezpečeny dvěma samostatnými knihovnami:

- 1) Ústřední knihovna Přírodovědecké fakulty umístěna v areálu na Kotlářské ulici.
- 2) Knihovna univerzitního kampusu, nově vzniklá v roce 2007 transformací Ústřední knihovny Lékařské fakulty MU, Knihovny Fakulty sportovních studií a integrací části Ústřední knihovny PřF MU. Knihovna je umístěna v areálu univerzitního kampusu v Bohunicích a slouží zejména studijním programům chemie a biochemie.

	Ústřední knihovna PřF MU	Knihovna univerzitního kampusu MU
Celkový počet svazků	357 310	31 741
Roční přírůstek knižních jednotek	5 070	798
Počet odebíraných titulů časopisů	603	79
Jsou součástí fondu kompaktní disky?	ano	ano
Jsou součástí fondů videokazety?	ano	ano
Otevírací hodiny knihovny/studovny v týdnu	42 hod týdně	47 hod týdně
Provozuje knihovna počítačové inform. služby?	ano	ano
Zajišťuje knihovna rešerše z databází?	ne, uživatelé samoobslužně	ano
Je zapojena na CESNET/INTERNET?	ano	ano
Počet stanic na CESNETu/INTERNETu	90	110
Počet počítačů v knihovně/studovně	79	91
Z toho počítačů zapojených v síti	79	91

<b>C – Pravidla pro vytváření studijních plánů SP (oboru) a návrh témat prací</b>					
<b>Vysoká škola</b>	Masarykova univerzita				
<b>Součást vysoké školy</b>	Přírodovědecká fakulta				
<b>Název studijního programu</b>	Biochemie				
<b>Název studijního oboru</b>	Biomolekulární chemie				
<b>Název předmětu</b>	<b>rozsah</b>	<b>způsob zák.</b>	<b>druh před.</b>	<b>přednášející</b>	<b>dop. roč.</b>
Seznam předmětů je uveden v doporučeném studijním plánu viz. Část C1.					
<b>Obsah a rozsah SZZk</b>					
<p>Závěrečná státní zkouška se skládá z:</p> <p>A) obhajoby diplomové práce</p> <p>B) z vlastní státní zkoušky.</p> <p>Státní závěrečná zkouška studentů oboru biomolekulární chemie sestává z hlavního předmětu biomolekulární chemie, a dvou volitelných předmětů ze skupiny:</p> <p>fyzikální chemie organická chemie molekulární biologie a genetiky biofyzika</p> <p><b>Požadavky ke státní závěrečné zkoušce z biomolekulární chemie</b></p> <p><b>Obecná biochemie a enzymologie</b></p> <p>Genetický kód, replikace DNA, transkripce. Metabolismus proteinů (degradace a biosynthesa). Mechanismus deaminace, transaminace a dekarboxylace aminokyselin, detoxikace amoniaku. Metabolismus sacharidů, glykolýza a glukoneogeneze, pentosový cyklus. Metabolismus lipidů a jeho kompartmentace. Oxidační dekarboxylace alfa-oxokyselin a Krebsův cyklus. Dýchací řetězec, oxidativní fosforylace, fotosyntéza. Principy regulace na úrovni enzymů a genů, signální dráhy (kovaletní modifikace, allostérie, regulace genové exprese, druhý posel, membránové receptory, G proteiny, proteinkinasy). Základní metody molekulární biologie (mutagenese, klonování, exprese proteinů). Stavba enzymů, pojmy holoenzym, apoenzym, kofaktor, koenzym, kosubstrát, prostetická skupina, multienzymové komplexy, mechanismy enzymové katalýzy. Kinetika enzymové katalýzy, aktivita, Michaelisova konstanta, vliv faktorů prostředí, inhibice.</p> <p><b>Struktura biomolekul</b></p> <p>Struktura proteinů. Popis struktury (souřadnice, torzní úhly), konformace peptidové páteře. Typy sekundárních struktur proteinů, terciární struktura (základní prvky trojrozměrné struktury, motivy, domény), vyšší struktury, interakce definující prostorové uspořádání proteinů. Struktura nukleových kyselin. Popis struktury (souřadnice, torzní úhly, helikální parametry), konformace páteře a pentosového kruhu. Sekundární struktury nukleových kyselin, rozdíly mezi DNA a RNA, interakce definující prostorové uspořádání nukleových kyselin. Struktura oligosacharidů a polysacharidů, konformace.</p> <p><b>Metody strukturní biologie</b></p> <p>Sekvence DNA a proteinů. Studium konformace biomakromolekul optickými metodami (CD, IR). Krystaly biopolymerů a jejich příprava, principy difrakčních technik, sběr difrakčních dat. Získávání map elektronových hustot z difrakčních dat, řešení fázového problému. Výstavba, upřesňování a kontrola správnosti strukturního modelu v rentgenové krystalografii. Principy nukleární magnetické rezonance, popis NMR experimentu, NMR proteinů a nukleových kyselin</p>					

Metody přiřazení rezonancí v NMR spektroskopii proteinů a nukleových kyselin.  
NMR experimenty pro určení geometrie biomakromolekul, výpočet struktur, sledování dynamiky.  
Molekulové modelování, popis geometrie, výpočet energie, hyperplocha potenciální energie a energetické bariéry.  
Molekulová mechanika a dynamika, silová pole, popis intermolekulárních interakcí, konformační analýza, docking.  
Metody kvantové chemie, přehled metod (semiempirické, ab initio, DFT), studium chemické reaktivity a enzymové katalýzy.  
Experimentální metody studia interakcí a stability biomakromolekul.  
Biologické databáze (proteinové a genomové, primární, sekundární a složené), analýza DNA sekvence (struktura genu, expresní profil, cDNA a EST).  
Párové přiložení sekvencí, identita a podobnost lokální a globální. Mnohonásobné přiložení sekvencí, konsensus sekvence.  
Predikce proteinových struktur (předpovídání sekundární, super-sekundární a terciální struktury).

#### **Literatura:**

- Drenth, J. Principles of Protein X-Ray Crystallography; Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, 1994.
- Leach, A. Molecular modelling: principles and applications; 2nd ed. Prentice Hall: Harlow England; New York, 2001.
- Attwood, T.; Parry-Smith, D. Introduction to Bioinformatics; 1st ed. Benjamin Cummings, 2001.
- Finkelstein, A. V.; Ptitsyn, O. Protein Physics: A Course of Lectures; 1st ed. Academic Press, 2002.
- Cavanagh, J. Fairbrother, W. J. III, A. G. P. Skelton, N. J.; Rance, M. Protein NMR Spectroscopy, Second Edition: Principles and Practice; 2nd ed. Academic Press, 2006.
- Neidle, S. Principles of Nucleic Acid Structure; 2nd ed. Academic Press, 2007.
- Levitt, M. H. Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance; 2nd ed. Wiley, 2008.
- Lesk, A. M. Introduction to Protein Science: Architecture, Function, and Genomics; 2nd ed. Oxford University Press, USA, 2010.
- Lewars, E. G. Computational Chemistry; Springer Netherlands: Dordrecht, 2011.
- Voet, D. Biochemistry; 4th ed. John Wiley & Sons: Hoboken NJ, 2011.

#### **Požadavky ke státní závěrečné zkoušce z fyzikální chemie**

##### **Vlastnosti molekul**

Schrödingerova rovnice, stacionární stav. Atomové a molekulové orbitály, překryv. Repulze elektronů - princip SCF metody. Spin a Pauliho princip. Geometrie molekuly. Elektronová struktura molekul, hraniční orbitály. Symetrie molekul, chiralita. Energetické stavy molekul. Mezimolekulové interakce.

##### **Interakce s fotony**

Klasifikace spektroskopických metod. Podmínky spektrálních přechodů. Rotační a vibrační spektra. Elektronová spektra, Franckův-Condonův princip. Fluorescence a fosforescence. Magnetické rezonanční metody, NMR. Difrakční metody.

##### **Základy termodynamiky**

Termodynamický systém a jeho popis. Rovnováha, teplota, 0. věta. Stavové veličiny. První věta termodynamická, vnitřní energie. Entalpie, tepelné kapacity. Reakční a slučovací entalpie. Teplotní závislost reakční entalpie.



Druhá věta termodynamická, samovolné děje. Entropie - definice a vlastnosti. Clausiova nerovnost. Entropie - teplotní závislost. Změna entropie při fázovém přechodu. Gibbsova a Helmholtzova funkce, samovolnost a maximální práce. Třetí věta termodynamická, absolutní entropie. Spojená formulace 1. a 2. věty. Závislost Gibbsovy funkce na teplotě a tlaku. Změna složení systému, chemický potenciál.

### **Ideální chování a fázové rovnováhy**

Roztoky - Raoultův a Henryho zákon. Ideální a reálné chování, fugacita a aktivita. Fázové rovnováhy, závislost chemického potenciálu na teplotě. Fázový diagram čisté složky, podmínka rovnováhy. Fázové pravidlo, stupně volnosti, fáze, složka. Destilace, pákové pravidlo. Fázové diagramy v dvousložkových soustavách.

### **Chemická rovnováha**

Termodynamický popis chemické rovnováhy. Závislost Gibbsovy funkce na rozsahu reakce, reakční kvocient. Standardní reakční Gibbsova funkce a rovnovážná konstanta. Chemická rovnováha ideálních a reálných plynů, rovnovážná konstanta. Chemická rovnováha v roztocích, rovnovážná konstanta. Závislost rovnovážné konstanty na teplotě. Závislost rovnovážného složení na tlaku.

### **Elektrochemie**

Ionty, elektrolytická disociace, silné a slabé elektrolyty. Meziiontové interakce, iontová atmosféra, iontová síla. Aktivity iontů, Debyeův-Hückelův limitní zákon. Elektrochemický potenciál, podmínka rovnováhy. Rozdíl potenciálů na fázovém rozhraní elektroda-roztok. Klasifikace elektrod, reversibilní elektroda. Kapalinový a membránový potenciál. Elektrochemické články, elektromotorické napětí emf, popis článků. Poločlánkové a celková článková reakce, Nernstova rovnice. Standardní emf článku a rovnovážná konstanta. Standardní potenciál elektrody, SHE.

### **Chemická dynamika**

Transport látky, zákony difúze. Zákon chemické kinetiky, rychlost změny koncentrace, rychlostní koeficient, řády reakce. Reakce 1. řádu, diferenciální a integrální rovnice, relaxace, poločas, střední doba života. Reakce 2. řádu. Reakce jednosměrné a obousměrné. Reakce následné. Reakce bočné. Mechanismus reakce, elementární reakce, rychlost určující krok. Teplotní závislost rychlostní konstanty, Arrheniova rovnice. Základní představy teorie aktivovaného komplexu, reakční koordináta.

### **Fázové rozhraní**

Termodynamika fázového rozhraní. Adsorpce, Langmuirova isoterma, chemisorpce. Roztoky makromolekul, polyelektrolyty. Soly, koloidy a micely.

### **Literatura:**

- Atkins, P. W. - Paula, Julio de. Atkins' physical chemistry. 8th ed. Oxford : Oxford University Press, 2006. xxx, 1064. ISBN 0-19-870072-5 (také 9th, 7th, 6th, eds)
- Atkins, P. W. Fyzikálna chémia. 6. vyd. Bratislava : Slovenská technická univerzita v Bratislave, 1999. 308 s. ISBN 80-227-1238-8.
- Kubáček, Pavel - Michaličková, Zdena. Základy fyzikální chemie. Elportál [online]. Brno: Masarykova univerzita, vyd. 19. 5. 2011
- Moore, Walter J. Fyzikální chemie. 2. vyd. Praha : Nakladatelství technické literatury, 1981. 974 s.
- Comprehensive dictionary of physical chemistry. Edited by Ladislav Ulický - Terence James Kemp. 1st pub. New York : Ellis Horwood, 1992. 472 s. ISBN 0-13-151747-3.
- Atkins, Peter William. The elements of physical chemistry. 3rd ed. Oxford : Oxford University Press, 2001. xiii, 548. ISBN 0-19-879290-5.

### **Požadavky ke státní závěrečné zkoušce z organické chemie**

Předmět organické chemie. Vazby v organických sloučeninách, hybridní stav uhlíku a geometrie. Homolýza a heterolýza vazeb, energie vazby, délka vazby, polarita vazby. Polarizovatelnost vazeb a molekul. Distribuce elektronů na vazbách, indukční a mesomerní efekt, konjugace. Vliv substituentů na rozdělení elektronů na skeletu – pí-donory, akceptory, sigma-donory, akceptory.

Mezimolekulové interakce, solvatace, vodíkové vazby a vliv na strukturu. Lipofilita. Mezifázové interakce a reakce (micelární katalýza, katalýza fázovým přenosem).

Termodynamika a kinetika organických reakcí. Regio- a stereoselektivita reakcí. Kineticky a termodynamicky kontrolované reakce. Měkkost a tvrdost reagentů, nábojově a orbitalově kontrolované reakce.

Kyselost a bazicita organických molekul.

Principy a metody Zelené chemie.

Aktivace molekul světlem, teplem, mikrovlnami a sonochemicky. Reakce aktivovaných molekul. Oxidační a redukční reakce na organických substrátech.

Izomerie, konformace a stereochemie organických molekul.

Reaktivní intermediáty a jejich relativní stabilita: karbeny, radikály, karbokationy, karbaniony.

Substituční a adiční radikálové reakce, jejich průběh, regioselektivita.

Pericyklické reakce-elektrocyclizační reakce, pravidla pro jejich průběh, cykloadiční reakce (Dielsovy-Alderovy), sigmatropní přesmyky.

Substituce a eliminace na nasyceném atomu uhlíku, průběh, stereochemie. Ambidentní nukleofily, regio- a stereoselektivita.

Substituční reakce na aromátech a heteroaromátech, vliv struktury na jejich průběh.

Elektrofilní adice na uhlíkaté substráty, vliv struktury na jejich průběh, stereochemie.

Nukleofilní adice na aktivované násobné vazby mezi uhlíky.

Nukleofilní adice na uhlík karbonylu, stabilní adukty, adičně eliminační a adičně substituční reakce, jejich průběh.

Aplikace organických molekul a jejich ansámblů ve společnosti.

#### **Literatura:**

- P. Hrnčiar: Organická chémia, SPN, Bratislava 1990.
- O. Červinka, V. Dědek, M. Ferles: Chemie organických sloučenin, SNTL, 1985.
- M. Kratochvíl, M. Potáček, J. Šibor: Principy a modely organické chemie. I. a II. díl, MU Brno, 2004.
- Mc Murry: Organická chemie, překlad z originálu 6. vydání, 2004, vydáno VUT Brno-nakladatelství VUTIUM a VŠCHT Praha, 2007.

### **Požadavky ke státní závěrečné zkoušce z molekulární biologie a genetiky**

Historie molekulární biologie, její současný vývoj a perspektivy.

Informační makromolekuly, genetická informace, genetický kód.

Gen, genom, proteom.

Molekulární struktura a organizace buněčného a virového genomu.

Replikace DNA prokaryotického a eukaryotického ~~a virového~~ genomu.

Transkripce a posttranskripční úpravy. Redakční úpravy hnRNA, sestřih a samosestřih. Translace a posttranslační úpravy. Struktura a funkce tRNA a ribozomů.

Regulace genové exprese u prokaryot a eukaryot. Pozitivní a negativní regulace genové exprese. Transkripční faktory. Regulace genové exprese na posttranskripční a translační úrovni. Malé RNA jako regulátory genové exprese.

Molekulární podstata mutace a rekombinace.

Reparace mutačně poškozené DNA.

Mobilní elementy prokaryot a eukaryot. Transpozony a retrotranspozony, mechanismus transpozice.

Základní metody molekulární biologie (restrikční a sekvenční analýza DNA, DNA hybridizace, klonování DNA, základní typy vektorů, polymerázová řetězová reakce)

Základy genového inženýrství (příprava transgenních organismů a jejich využití ve výzkumu a v praxi, mutageneze in vitro, genová terapie).

#### **Literatura:**

- Rosypal, S. Úvod do molekulární biologie I, II, III. S. Rosypal, Brno. (1998-2000).
- Šmarda J. a kol.. Metody molekulární biologie, MU Brno, 2005.
- Alberts et al.: Molecular biology of the cell. Garland Publ. New York, 2004.
- Alberts a kol: Základy buněčné biologie, Espero, Ústí nad Labem, 2000, 2005.
- Clark D.: Molecular biology, Elsevier, Amsterdam, 2005.
- Snustad D.P., Simmons M.J.: Genetika (překlad originálu Principles of Genetics), MU Brno, 2009

#### **Požadavky ke státní závěrečné zkoušce z biofyziky**

Fyzikálně-chemické základy biofyziky, termodynamika, elektrochemie, koloidní chemie.

Konformace DNA, Formy DNA A,B,Z, tří- a čtyřřetězcové molekuly DNA. Zakřivení DNA, Přechod šroubovice - klubko. Síly stabilizující dvoušroubovici. Interakce DNA s ionty, nadšroubovicová struktura DNA, kondenzované formy DNA, struktura chromatinu, chromosom opravy poškozené DNA. Úplná oprava, excisní úpravy, tolerantní opravy, kancerogeneze.

Struktury RNA, funkce v buňce.

Proteiny. Struktury, relativní molekulová hmotnost M, číselný a váhový průměr.

Struktura a funkce biologických membrán, elektrické vlastnosti membrán.

Interakce biopolymerů s elektrickým a magnetickým polem, elektronová spektra, optická anisotropie a aktivita. Lineární dvojlom a lineární dichroismus. Cottonův jev, spektra ORD a CD. Dichroismus za toku, v elektrickém a magnetickém poli. Stanovení konformačních změn nukleových kyselin ze spekter ORD, CD, elektrochromismu a

magnetického CD.

Hydrodynamické metody, viskozita, sedimentace, difuze, osmóza.

Spektroskopické metody, UV spektroskopie, CD, LD a ORD, metody využívající orientace molekul, dielektrická spektroskopie.

Separační metody. Princip gelové a pulsní elektroforézy.

Elektrochemické metody, klasická, pulsní, a.c. polarografie a impedanční měření. Použití ke studiu interakcí monomerních složek nukleových kyselin a ke studiu konformace biopolymerů v roztoku a při interakci s elektricky nabitým povrchem.

#### Literatura:

- Cantor, C.R. and Scimmell P.R. Biophysical chemistry. Freeman, San Francisco, 1980.
- Daune, M. Molecular biophysics. Oxford University Press, Oxford, 1999.
- Prosser V. a kol. Experimentální metody biofyziky. Academia, Praha, 1989.

#### Požadavky na přijímací řízení

V základu vycházejí tyto požadavky z obecných požadavků na navazující magisterské studium v programu Biochemie. Náplň přijímací zkoušky je identická s náplní státní závěrečné zkoušky bakalářského oboru Biochemie. Požadavky v sobě zahrnují ohled na specifické aspekty oboru a jsou z těchto okruhů - obecná a fyzikální, organická, analytická chemie, biologie a biochemie.

Forma: písemná zkouška; 8 otázek z každého oboru

Okruhy otázek

#### Obecná a fyzikální chemie

Hmota a energie. Struktura atomového jádra a atomu. Základní chemické slučovací zákony. Elektronová struktura atomů. Vlnová funkce, Schrödingerova rovnice, atomové orbitály, energie atomových orbitalů ve vodíkovém atomu. Periodicita elektronových konfigurací a periodicitu vlastností atomů.

Základní a excitovaný stav, atomová spektra. Elektronová struktura molekul. Teorie valenční vazby. Hybridizace atomových orbitalů. Teorie molekulových orbitalů (MO). Typy a tvary molekulových orbitalů, typy kovalentních vazeb (s, p, d). Řád vazby. Polarizovatelnost molekul. Iontové sloučeniny a iontová vazba. Zjišťování krystalové struktury, difrakce roentgenova záření. Kovová vazba, síla vazby. Slabé interakce mezi molekulami, vazba vodíkovým můstkem, van der Waalovy síly. Elektrické, magnetické a optické vlastnosti molekul. Interakce záření s hmotou.

Chemická termodynamika. Tepelná rovnováha, teplota, tlak, nultá věta. První věta, vnitřní energie, teplo, práce. Entalpie, tepelné kapacity. Druhá věta. Entropie, termodynamická reverzibilita. Chemický potenciál. Třetí věta.

Chemické rovnováhy. Závislost Gibbsovy funkce na rozsahu reakce. Rovnovážná konstanta a její závislost na tlaku a na teplotě. Le Chatelierův princip. Základní pojmy statistické termodynamiky.

Vlastnosti kapalin a mezimolekulární síly. Tenze par kapaliny. Osmotický tlak.

Elektrolytická disociace iontových látek, Vodivost iontů, silné a slabé elektrolyty, elektrolytická vodivost, aktivita elektrolytu, aktivitní koeficient, iontová síla roztoku.

Rovnovážná elektrochemie. Termodynamika roztoků elektrolytů. Galvanické a elektrolytické články. Standardní potenciál elektrody. Druhy elektrod. Oxidace a redukce. Elektroda prvního a druhého druhu, Nernstova rovnice, vodíková elektroda, galvanický článek. Oxidoredukční elektroda, Petersova rovnice. Změna Gibbsovy volné

energie a rovnovážná konstanta elektrochemických reakcí. Disproporcionační reakce. Faradayův zákon.

Kinetická teorie ideálního plynu, Maxwell-Boltzmannova funkce rozdělení rychlostí, střední kinetická energie a rychlost molekul plynu, počet mezimolekulárních srážek. Ideální plyn, stavová rovnice ideálního plynu.

Chemická kinetika. Rychlost chemických reakcí, rychlostní zákon, rychlostní konstanta a řády reakcí. Molekularita. Vratné, následné, paralelní a řetězové reakce. Fyzikální a chemická adsorpce. Srážková teorie, účinné srážky. Teorie aktivovaného komplexu. Reakční koordináta, aktivační energie, vliv teploty na reakční rychlost. Katalýza: katalyzátory, katalyzované reakce, autokatalýza, homogenní katalýza. Adsorpce a chemisorpce, heterogenní katalýza. Fotochemické reakce. Radikálové reakce.

### Organické chemie

Principy tvorby systematického názvosloví organických sloučenin.

Alkany a cykloalkany. Izomerie řetězová, konformace alkanů a cykloalkanů. Radikálové reakce jako typická reakce alkanů a jejich mechanismus.

Alkeny, geometrická isomerie u alkenů. Cahn, Ingold, Prelogova pravidla. Adiční reakce, mechanismus a stereochemie adičních reakcí. Polymerace.

Optická aktivita a symetrie molekul. Chiralita molekul, podmínky chiralit, zobrazování trojrozměrných molekul v rovině. Optická izomerie, specifická rotace, optická čistota, racemická směs. Určování absolutní konfigurace molekul. Mezoforma.

Alkiny a jejich struktura. Vlastnosti trojné vazby, adiční reakce (elektrofilní i nukleofilní reakce), kyselost atomů vodíku vázaných na sp-hybridní uhlík.

Aromatický stav a jeho demonstrace (rezonanční - delokalizační energie). Benzoidní a nebenzoidní aromáty. Vlastnosti aromatických sloučenin, mechanismus elektrofilní aromatické substituce. Vliv substituce na jádře na vstup elektrofilu. Adiční a oxidační reakce a jejich podmínky. Reakce na kondensovaných aromatických sloučeninách.

Halogenderiváty a jejich strukturní typy, reaktivita.

Hydroxysloučeniny-alkoholy a fenoly. Reaktivita hydroxylové skupiny, kyselost a vliv uhlíkatého zbytku na míru kyselosti. Oxidace alkoholů. Polyhydroxyderiváty.

Thioly a sulfidy. Produkty oxidace. Sulfonové kyseliny a jejich funkční deriváty (sulfochloridy, estery, sulfonamidy). Estery minerálních látek (sulfáty, nitráty, nitrity, fosfáty).

Aminosloučeniny. Základní chemické vlastnosti. Nitrosoučeniny, vliv nitroskupiny na uhlíkatý zbytek. Azosoučeniny, azoxysloučeniny a hydrazolátky. Nitrily a izokyanidy.

Organokovové sloučeniny.

Karboxylové sloučeniny. Charakterizace karbonylu, nukleofilní adice, reakce s kyslíkatými, dusíkatými a uhlíkatými nukleofily. Oxidace a redukce aldehydů a ketonů.

Karboxylové kyseliny, jejich struktura a chemické vlastnosti. Funkční deriváty karboxylových kyselin (estery, halogenidy, anhydridy, amidy), jejich příprava, vlastnosti a využití v organické syntéze. Deriváty kyseliny uhličitě.

Heterocyklické sloučeniny. Elektronová struktura a vliv na chemické vlastnosti, srovnání jejich chemických vlastností.

### Analytická chemie

Analytické reakce. Popis rovnováh. Redoxní rovnováhy, standardní a formální potenciál, redoxní disproporcionace. Principy kvalitativní chemické analýzy.

Gravimetrie. Teorie vzniku sraženin, pochody na sraženinách; vážení; zpracování sraženin, gravimetrické postupy.

Titrační metody. Výklad titračních křivek, vztah mezi inflexním a ekvivalenčním bodem, strmost a tlumivě oblasti křivek, titrační roztoky a primární standardy, indikace ekvivalenčního bodu, titrační chyby. Acidobazické titrace, acidobazické tlumivé roztoky. Komplexometrické titrace. Chelatometrie. Srážecí titrace. Redoxní titrace.

Hodnocení výsledků analýz. Statistika a základy SLP (GLP), analytický signál, kalibrační křivky, standardizace. Parametry analytické metody. Chyby a jejich vztah k parametrům analytických metod. Statistické vyhodnocení analytických výsledků. Referenční materiál, kruhový test. Lineární regrese.

Elektroanalytické metody. Potenciometrické metody. Indikační a referenční elektrody, iontově selektivní elektrody, skleněná elektroda. Měření pH. Potenciometrická indikace průběhu titrací a ekvivalenčního bodu, Granova linearizace titračních křivek. Konduktometrické metody. Elektrogravimetrie, coulometrie. Polarizační křivky, vylučovací proud, Faradayův proud. Elektrolýza při konstantním potenciálu a při konstantní intenzitě proudu. Elektrolytické dělení kovů. Coulometrie při konstantním potenciálu a při konstantním proudu. Coulometrické titrace. Voltamperometrie, polarografie. Polarografická analýza. Amperometrické, biamperometrické a bipotenciometrické titrace.

Optické analytické metody. Elektromagnetické záření, Bouguer-Lambert-Beerův zákon, příčiny absorpce a emise záření. Molekulová absorpční spektroskopie (UV, VIS, IR), atomová absorpční a emisní spektroskopie, luminiscenční metody,

Separační metody. Kapalinová extrakce. Extrakční rovnováhy v dvoufázovém systému. Analytické využití ionexů. Chromatografie na tenké vrstvě sorbentu. Analýza plynů. Plynová chromatografie, HLPC - vysokoučinná kapalinová chromatografie, základy instrumentace, kvalitativní a kvantitativní charakteristiky, použití. Elektromigrační metody, zonální elektroforéza, elektroforéza na nosičích a izotachoforéza.

Základy analýzy organických sloučenin. Kvalitativní a kvantitativní charakteristika. Elementární analýza, analýza funkčních skupin, určování čistoty sloučenin, základy přístupu při určování struktury organických sloučenin. Stanovení látek ve složitějších směsích.

### Biochemie

Aminokyseliny, jejich vzorce, acidobazické rovnováhy, izoelektrický bod,

Peptidy, peptidová vazba, primární, sekundární, terciární, kvartérní struktura, metody stanovení primární a sekundární struktury, souvislost mezi primární a sekundární strukturou, vazby stabilizující sekundární strukturu. Metody dělení a izolace bílkovin, chování bílkovin v roztoku (IEC, afinitní chromatografie, GPC, elektroforéza, elektroforéza v SDS, izoelektrická fokusace).

Biochemie hemoglobinu,

Sacharidy, pentózy, hexózy, aldózy, ketózy. Glycosidy, glykosidová vazba a její vlastnosti, disacharidy, homopolysacharidy (škrob, celulóza, glykogen, chitin), heteropolysacharidy, proteoglykany.

Lipidy, acylglyceroly, mastné kyseliny, glycerofosfolipidy, plazmalogeny, sfingolipidy, steroidy, lipoproteiny.

Nukleové kyseliny, baze, DNA, RNA, typy šroubovice DNA, superhelikální struktura, vazby stabilizují sekundární strukturu DNA. Termodynamika enzymových reakcí. makroergické vazby. Reakční kinetika, enzymy jako biokatalyzátory, aktivní místo, katalytické místo, kofaktory, koenzymy a prostetické skupiny, mechanismus působení serinových proteináz., Rovnice Michaelise-Mentenové, metody stanovení  $K_m$  a  $V_L$ , číslo přeměny, aktivita enzymu, konstanta specifity, Inhibice enzymové reakce, dvousubstrátové reakce, Regulace enzymové aktivity: pH, zymogeny, kovalentní modifikace (fosforylace, adenylace, disulfidy).

Anaerobní glykolýza, její jednotlivé kroky, energetická bilance. Substrátová fosforylace. Glukoneogeneze. Krebsův cyklus, Pentosafosfátová dráha. Oxidace mastných kyselin, syntéza mastných kyselin, acetogeneze. Odbourávání aminokyselin. Rozdělení a význam proteáz. Vylučování dusíku, močovinový cyklus. Respirační řetězec, jeho komponenty. Oxidační fosforylace, Membránový transport, Fotosyntéza, temnostní fáze, světelná fáze.

Mechanismus svalového stahu, biochemie vidění, přenos nervového vzruchu. Imunochemie. Hormony. Mechanismus funkce některých hormonů (adrenalin, glukagon, prostaglandiny, steroidní hormony, thyroxin, inzulin, rostlinné hormony). Druhý posel. Struktura a funkce G-proteinů. Xenobiochemie, cytochrom P450.

## Biologie

Živočišné buňky. Tvar a stavba živočišných buněk, buněčné organoidy a jejich funkce, segregční a endosymbiotická teorie. Chromozómy, amitóza, mitóza a její modifikace, meióza, význam jednotlivých typů dělení. Živočišné tkáně (krycí, oporná, pohybová, trávicí, dýchací, vylučovací a osmoregulační, oběhu tělních tekutin, smyslová, nervová, žláz s vnitřní sekrecí, rozmnožovací, svalové tkáně, nervové tkáně, pohlavní buňky), pojiva, tělní tekutiny.

Strukturní charakteristiky rostlinných buněk. Primární a sekundární meristémy, dělení a diferenciacie buněk. Hlavní typy rostlinných pletiv. Základní anatomické charakteristiky kořenů, stonků a listů. Transport vody, solí a plynů v rostlinách, řízení látkových toků. Fyziologické přístupy ke studiu metabolických procesů v rostlinách.

Struktura a funkce mikrobiální buňky. Růst a množení mikroorganismů. Vliv vnějšího prostředí na růst a množení mikroorganismů. Výživa mikroorganismů. Buněčný cyklus bakterií. Buněčný cyklus kvasinek. Genetická informace. Odlišnosti metabolismu prokaryot a eukaryot. Mutace a mutageny. Mutace u mikroorganismů a mutageny. Auxotrofní mutanti a mutanti rezistentní k antibiotikům. Plazmidy. Přenos znaků a genetická rekombinace u bakterií (transformace, transdukce, konjugace).

### **Další povinnosti / odborná praxe**

-

### **Návrh témat prací a obhájené práce**

Témata diplomových prací vypisuje rada NCBR na návrh učitelů a zveřejňuje jejich aktuální nabídku v dostatečném počtu. Student si z aktuální nabídky svobodně volí téma diplomové práce. O zadání diplomové práce na zvolené téma žádá student na začátku prvního semestru magisterského studia učitele, který téma navrhl. Zadáním diplomové práce se učitel, který téma vypsál, stává pro studenta, který si ho vybral, vedoucím diplomové práce. Rada NCBR písemně zadání diplomových prací registruje a archivuje. Student může kterémukoliv učiteli navrhnout téma své diplomové práce nebo se na tomto tématu dohodnout. V tomto případě navrhuje učitel téma diplomové práce pro konkrétního studenta.

### **Příklad závěrečné práce**

#### Zadání diplomové práce

Magisterský studijní program: Biochemie

Studijní obor: Biomolekulární chemie

Student(ka): Mgr. Olga Třísková

Název tématu: Studium proteinů účastnících se signální dráhy rostlinných hormonů pomocí nukleární magnetické rezonance

Vedoucí diplomové práce: doc. Mgr. Lukáš Židek, Ph.D.

Odborný konzultant:

Datum zadání diplomové práce: září 2009

Datum odevzdání diplomové práce: duben 2010

V Brně, dne 1.10.2009

Zásady pro vypracování:

Celkové schema signálních drah rostlinných hormonů bylo v posledních letech navrženo, velmi málo je ale známo o molekulární stavbě proteinů, které signály přenáší. Některé z těchto proteinů jsou poměrně malé a jejich struktura a vzájemné interakce mohou být studovány pomocí nukleární magnetické rezonance. Cílem práce bude naměřit NMR spektra vybraného isotopově značeného proteinu a provést přiřazení frekvencí jednotlivým jádrům v molekule proteinu. Výsledky budou použity k interpretaci strukturních a interakčních studií.

Seznam odborné literatury:

Protein NMR spectroscopy :Principles and practice. Edited by John Cavanagh. 2nd ed. Amsterdam : Elsevier, 2007. xxv, 885 s. ISBN 978-0-12-164491.

[https://is.muni.cz/th/175607/prif\\_m/](https://is.muni.cz/th/175607/prif_m/)

Další příklady obhájených diplomových prací :

**Babinský, Martin**

Fakulta: *Přírodovědecká fakulta*

Rok: 2009, studium *úspěšně absolováno*, udělen titul: *Mgr.*

Studijní program: *Biochemie*

Studijní obor: *Biomolekulární chemie*

Obhajoba diplomové práce: *Vazebný mód kvartérních izochinolinových alkaloidů na d(AAGAATTCTT)2.*

[https://is.muni.cz/th/151360/prif\\_m/](https://is.muni.cz/th/151360/prif_m/)

**Fukal, Jiří**

Fakulta: *Přírodovědecká fakulta*

Rok: 2007, studium *úspěšně absolováno*, udělen titul: *Mgr.*

Studijní program: *Biochemie*

Studijní obor: *Biomolekulární chemie*

Obhajoba diplomové práce: *Studium konformačního chování restriční endonukleasy HINC II metodami. molekulové dynamiky.*

[https://is.muni.cz/th/77702/prif\\_m/](https://is.muni.cz/th/77702/prif_m/)

**Pasulka, Josef**

Fakulta: *Přírodovědecká fakulta*

Rok: 2008, studium *úspěšně absolováno*, udělen titul: *Mgr.*

Studijní program: *Biochemie*

Studijní obor: *Biomolekulární chemie*

Obhajoba diplomové práce: *Studium interakcí mezi proteiny a RNA pomocí molekulové dynamiky.*

[https://is.muni.cz/th/105979/prif\\_m/](https://is.muni.cz/th/105979/prif_m/)

**Pěntáková, Monika**

Fakulta: *Přírodovědecká fakulta*

Rok: 2009, studium *úspěšně absolováno*, udělen titul: *Mgr.*

Studijní program: *Biochemie*

Studijní obor: *Biomolekulární chemie*

Obhajoba diplomové práce: *Studium OB foldu a jeho molekulově-dynamických vlastností.*

[https://is.muni.cz/th/274921/prif\\_m/](https://is.muni.cz/th/274921/prif_m/)

Archív závěrečných prací obhájených na Masarykově univerzitě od r 2006 je na: <https://is.muni.cz/thesis/>.

**Návaznost na další stud. program**

Absolventi by měli mít znalosti i schopnosti jak pro odchod přímo do praxe, tak i pro další studium v rámci doktorských studijních programů, především DSP Biochemie, obor Biomolekulární chemie.



## C1 – Doporučený studijní plán

Studijní plán si sestavuje každý student dle své volby podle pravidel studijního programu. Při sestavení studijního plánu musí student dodržet ustanovení Studijního a zkušebního řádu fakulty a Pravidla a podmínky pro vytváření studijního plánu v daném studijním programu. Jako východisko k tvorbě studijního plánu může student využít Doporučeného studijního plánu. Doporučený studijní plán rovnoměrně rozkládá studium do standardní doby dvou let a může se stát závazným jedině volbou studenta. Zaručuje studentům, kteří podle něho studují splnění povinností nutných k ukončení magisterského studia během standardní doby. Fakultní rozvrh (časová a prostorová alokace výuky předmětů pro daný semestr) je zpracován v návaznosti na doporučené studijní plány.

Povinné předměty a povinně volitelné předměty a jejich návaznosti jsou uvedeny v doporučeném studijním plánu. Pro studijní obor Biomolekulární chemie jsou povinné předměty C7920 Struktura a funkce proteinů, C7925 Struktura a dynamika nukleových kyselin a C2135 Bioinformatika v praxi. Povinným předmětem bez kreditového hodnocení je dvouhodinová blokovaná přednáška Zacházení s chemickými látkami, kterou musí každý student absolvovat na začátku každého akademického roku a jejíž absolvování je nutnou podmínkou pro vstup do všech předmětů, ve kterých dochází k manipulaci s chemickými látkami (laboratorních cvičení, diplomových prací apod.). Student může požádat garanta programu, aby mohl namísto povinného předmětu zapsat předmět analogický obsahem, se stejným ukončením a stejného nebo většího rozsahu. Pokud student úspěšně absolvoval povinný předmět již během bakalářského studia nahradí ho jedním z povinně volitelných předmětů stejného nebo většího rozsahu. Student je dále povinen absolvovat alespoň jeden povinně volitelný předmět z každého z následujících čtyř okruhů: Okruh I (C8160 Enzymologie, C9100 Biosenzory), Okruh II (C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I, C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I – cvičení, C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II, C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II - cvičení), Okruh III (C5320 Fyzikální základy NMR spektroskopie, C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules) a Okruh IV (C8801 Krystalografie biomakromolekul, CB070 Proteinová krystalografie, CB080 Proteinová krystalografie seminář). Dalšími povinně volitelnými předměty jsou Oborový seminář a Diplomová práce. Zakočení povinných a povinně volitelných předmětů je zpravidla zkouškou u přednášky, klasifikovaným zápočtem u laboratorního cvičení a zápočtem u semináře. Jeden z povinných předmětů Struktura a funkce proteinů nebo Struktura a dynamika nukleových kyselin a jeden z povinně volitelných předmětů mohou být zakončeny kolokviem.

Při tvorbě a plnění studijního plánu musí každý student studijního programu dodržet následující pravidla a podmínky:

- Na začátku každého akademického roku absolvovat povinnou dvouhodinovou blokovanou přednášku bez kreditového hodnocení Zacházení s chemickými látkami, jejíž absolvování je nutnou podmínkou pro vstup do všech předmětů, ve kterých dochází k manipulaci s chemickými látkami (diplomových prací ap.).
- Do termínu konání magisterské státní závěrečné zkoušky získat 11 kreditů za úspěšné ukončení povinných předmětů C7920 Struktura a funkce proteinů, C7925 Struktura a dynamika nukleových kyselin a C2135 Bioinformatika v praxi.
- Získat 8 kreditů za absolvování předmětů C7000, C8000, C9000 a CA000 Oborový seminář (zakončen zápočtem).
- Za absolvování volitelných předmětů musí student získat minimálně 34 kreditů.
- Zpracovat diplomovou práci na zadané téma. Kreditová hodnota diplomové práce je 50 kreditů.
- Do termínu konání magisterské státní závěrečné zkoušky získat nejméně 15 kreditů absolvováním nejméně jednoho povinně volitelného předmětu z každého z výše uvedených Okruhů I až IV. Povinně volitelné přednášky jsou ukončené zkouškou, cvičení zápočtem a jedna z povinně volitelných přednášek může být ukončena kolokviem.
- Do termínu konání magisterské státní závěrečné zkoušky získat absolvováním povinných, povinně volitelných a volitelných předmětů 120 kreditů. Volitelné předměty jsou všechny předměty, které jsou na Přírodovědecké fakultě a ostatních fakultách Masarykovy univerzity v daném období vyučovány a jejichž zápis je pro studenty daného programu povolen. Výběr volitelných předmětů je omezen na povinnost absolvovat minimum 108 kreditů za úspěšné ukončení předmětů přírodovědeckých, matematických nebo inženýrských věd, z toho minimálně 96 kreditů za předměty z oboru chemických a biologických věd. Volitelné předměty zvláště vhodné pro magisterský studijní program Biochemie, obor Biomolekulární chemie, jsou uvedeny v Doporučeném studijním plánu. Zakončení volitelných předmětů si student vybírá z možných zakončení předmětu.
- Student musí úspěšně vykonat zkoušku z předmětu JA002 Pokročilá odborná angličtina – zkouška před přihlášením k magisterské státní závěrečné zkoušce pokud tuto nevykonal v rámci svého předchozího bakalářského studia.
- Úspěšně absolvovat všechny součásti magisterské státní závěrečné zkoušky.

## 1. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
<b>Podzimní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">C7777</a>	Zacházení s chemickými látkami	0	0/0	z	<a href="#">Příhoda</a>
<a href="#">C7920</a>	Struktura a funkce proteinů	2+2	2/0	zk	<a href="#">Brzobohatý, Damborský, Marek</a>
<a href="#">C7925</a>	Struktura a dynamika nukleových kyselin	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šponer</a>
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelný předmět I	3			
<a href="#">CB060</a>	Seminář NCBR	2	0/2	z	<a href="#">Sklenář</a>
<a href="#">C9300</a>	Diplomová práce I (BC)	5	0/0/5	kz	<a href="#">Janiczek</a>
Doporučené volitelné předměty					
-	Z výběru doporučených volitelných předmětů	12			
<b>Jarní semestr</b>					
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelný předmět II	4			
-	Povinně volitelný předmět III	4			
<a href="#">CC060</a>	Seminář NCBR	2	0/2	z	<a href="#">Koča</a>
<a href="#">C2135</a>	Bioinformatika v praxi	2+1	0/2	k	<a href="#">Wimmerová</a>
<a href="#">C8210</a>	Diplomová práce II (BC)	10	0/0/10	kz	<a href="#">Janiczek</a>
Doporučené volitelné předměty					
-	Z výběru doporučených volitelných předmětů	10			

## 2. rok studia

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
<b>Podzimní semestr</b>					
Povinně volitelné předměty					
-	Povinně volitelný předmět IV	4			
<a href="#">CB060</a>	Seminář NCBR	2	0/2	z	<a href="#">Sklenář</a>
<a href="#">C9310</a>	Diplomová práce III (BC)	10	0/0/10	kz	<a href="#">Janiczek</a>
Doporučené volitelné předměty					
-	Z výběru doporučených volitelných předmětů	12			
<b>Jarní semestr</b>					
Povinné předměty					
<a href="#">JA002</a>	Pokročilá odborná angličtina - zkouška	2		zk	<a href="#">Rozkošná, Němcová</a>
Povinně volitelné předměty					
<a href="#">CA340</a>	Diplomová práce IV (BC)	25	0/0/25	kz	<a href="#">Janiczek</a>
<a href="#">CC060</a>	Seminář NCBR	2	0/2	z	<a href="#">Koča, Sklenář</a>

### Povinně volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
<b>Podzimní semestr</b>					
Povinně volitelné předměty					
<a href="#">CB070</a>	Proteinová krystalografie	1+2	1/0	zk/k	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">CB080</a>	Proteinová krystalografie - seminář	1	0/1	z	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">C5320</a>	Fyzikálně chemické základy NMR	3+2	2/1	zk/k	<a href="#">Sklenář</a>
<a href="#">C7790</a>	Počítačová chemie a molekulové modelování I	1+2	1/0	zk/k	<a href="#">Koča</a>
<a href="#">C7800</a>	Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení	1	0/1	z	<a href="#">Koča</a>
<a href="#">C9100</a>	Biosenzory	2+2	2/0	zk/k	<a href="#">Skládal</a>
<b>Jarní semestr</b>					
Povinně volitelné předměty					
<a href="#">C6770</a>	NMR Spectroscopy of Biomolecules	2+2	2/0	zk	<a href="#">Židek</a>
<a href="#">C8160</a>	Enzymologie	2+2	2/0	zk/k	<a href="#">Kučera</a>
<a href="#">C8801</a>	Krystalografie biomakromolekul	2+2	2/0	zk	<a href="#">Wimmerová</a>
<a href="#">C8855</a>	Počítačová chemie a molekulové modelování II	2	1/0	zk/k	<a href="#">Koča, Kříž</a>
<a href="#">C8856</a>	Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení	1	0/1	z	<a href="#">Koča</a>

### Doporučené volitelné předměty

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
<b>Podzimní semestr</b>					
Doporučené volitelné předměty					
<a href="#">Bi5220</a>	Imunologie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Lojek</a>
<a href="#">Bi7201</a>	Základy genomiky	1+2	1/0	zk	<a href="#">Hejátko</a>
<a href="#">C2110</a>	Operační systém UNIX a základy programování	2+1	0/2	k	<a href="#">Kulhánek</a>
<a href="#">C3200</a>	Chemická literatura	1+2	1/0	zk	<a href="#">Mazal</a>
<a href="#">C4300</a>	Chemie životního prostředí I - Environmentální procesy	2+2	2/0	zk	<a href="#">Holoubek</a>
<a href="#">C5020</a>	Chemická struktura	2+2	2/0	zk	<a href="#">Brož</a>
<a href="#">C5120</a>	Počítače v chemii a chemometrie	1+1	1/0	k	<a href="#">Farková</a>
<a href="#">C5300</a>	Statistická termodynamika	2+2	2/0	zk	<a href="#">Šob</a>
<a href="#">C5340</a>	Nerovnovážné systémy	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kučera</a>
<a href="#">C5850</a>	Biofyzikální chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Trnková</a>
<a href="#">C5860</a>	Aplikovaná NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Brož</a>
<a href="#">C7830</a>	Kapilární elektroforéza	2+2	2/0	zk	<a href="#">Havel</a>
<a href="#">C7860</a>	Rostlinná biochemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kašparovský</a>
<a href="#">C7870</a>	Biometrika	2+2	2/0	zk	<a href="#">Mandl</a>
<a href="#">C7880</a>	Separační metody II	2+2	2/0	zk	<a href="#">Glatz, Janiczek</a>
<a href="#">C7895</a>	Hmotnostní spektrometrie biomolekul	2+2	2/0	zk	<a href="#">Preisler</a>
<a href="#">C7910</a>	Metody chemického výzkumu	2+2	2/0	zk	<a href="#">Zbořil</a>
<a href="#">C8857</a>	Protein Preparation and Characterization III - Protein-Mediated Interaction	1+2	1/0	zk	<a href="#">Krejčí</a>
<a href="#">C8951</a>	NMR spektroskopie pevného stavu - základní principy a aplikace	1+2	1/0	zk	<a href="#">Marek</a>

kód	název předmětu	kredit	rozsah	ukončení	vyučující
	v chemii.				
<a href="#">C9920</a>	Úvod do kvantové chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Munzarová</a>
<a href="#">F5030</a>	Základy kvantové mechaniky	4+2	2/2	zk	<a href="#">Munzar</a>
<a href="#">F5351</a>	Základy molekulární biofyziky	2+2	2/1	zk	<a href="#">Kubíček, Šponer</a>
<a href="#">XV004</a>	Výzkum a vývoj v praxi	4	2/2	kz	<a href="#">Janouškovcová</a>
<b>Jarní semestr</b>					
Doporučené volitelné předměty					
<a href="#">Bi8090</a>	Genové inženýrství	2+2	2/0	zk	<a href="#">Doškař</a>
<a href="#">Bi8202</a>	Základy proteomiky	1+2	1/0	zk	<a href="#">Hejátko</a>
<a href="#">Bi8202c</a>	Základy proteomiky - cvičení	3	0/3	z	<a href="#">Hejátko</a>
<a href="#">Bi8980</a>	Příprava a charakterizace proteinů I - Expres a purifikace	2+2	2/0	zk	<a href="#">Janda</a>
<a href="#">C4310</a>	Chemie životního prostředí II - Zdroje znečištění, složky prostředí a jejich znečištění - technosféra, atmosféra	2+2	2/0	zk	<a href="#">Holoubek</a>
<a href="#">C4840</a>	Metody značení a imobilizace biomolekul	2+2	2/0	zk	<a href="#">Skládal</a>
<a href="#">C6200</a>	Biochemické metody	4+2	4/0	zk	<a href="#">Glatz, Zbořil</a>
<a href="#">C6210</a>	Biotechnologie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Mandl</a>
<a href="#">C6260</a>	Metody separace proteinů	1+2	1/0	zk	<a href="#">Glatz</a>
<a href="#">C6310</a>	Symetrie molekul	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kubáček</a>
<a href="#">C6800</a>	Multinukleární NMR spektroskopie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Pinkas</a>
<a href="#">C6950</a>	Chemická exkurze	0	0/0	z	<a href="#">Janků</a>
<a href="#">C6960</a>	Odborná praxe	0	0/0	z	<a href="#">Koča</a>
<a href="#">C8140</a>	Bioenergetika	2+2	2/0	zk	<a href="#">Kučera</a>
<a href="#">C8150</a>	Bioenergetika - seminář	2	0/2	z	<a href="#">Kučera</a>
<a href="#">C8170</a>	Enzymologie - seminář	2	0/2	z	<a href="#">Skládal</a>
<a href="#">C8800</a>	Rtg strukturní analýza	2+2	2/0	zk	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">C8857c</a>	Protein Preparation and Characterization III - practice	3	0/2	kz	<a href="#">Krejčí</a>
<a href="#">C8862</a>	Výpočty volných energií - cvičení	1	/1	z	<a href="#">Kulhánek</a>
<a href="#">C8863</a>	Výpočty volných energií	2+1	2	zk	<a href="#">Kulhánek</a>
<a href="#">C8950</a>	NMR - Strukturní analýza	2+2	2/0	zk	<a href="#">Marek</a>
<a href="#">C9085</a>	Protein-RNA interactions	1+2	1/0	zk	<a href="#">Štefl</a>
<a href="#">C9930</a>	Metody kvantové chemie	2+2	2/0	zk	<a href="#">Munzarová</a>
<a href="#">F8310</a>	Molekulové interakce a jejich úloha v biologii a chemii	3+1	2/0	k	<a href="#">Šponer</a>

## E – Personální zabezpečení studijního programu – souhrnné údaje

<b>Vysoká škola</b>	Masarykova univerzita											
<b>Součást vysoké školy</b>	Přírodovědecká fakulta											
<b>Název studijního programu</b>	Biochemie											
<b>Název studijního oborů</b>	Biochemie, Analytická biochemie a Biomolekulární chemie											
<b>Název pracoviště</b>	<b>celkem</b>	<b>prof. celkem</b>	<b>přepoč. počet p.</b>	<b>doc. celkem</b>	<b>přepoč. počet d.</b>	<b>odb. celkem</b>	<b>as.</b>	<b>z toho s věd. hod.</b>	<b>lektori</b>	<b>asistenti</b>	<b>vědečtí pracov.</b>	<b>THP</b>
Ústav biochemie (ÚB)	36	2	1,500	7	5,375	2		2	1	0	1	23
Národní centrum pro výzkum biomolekul (NCBR)	24	3	0,700	2	1,325	1		1	0	0	4	14

## F – Související vědecká, výzkumná, vývojová, umělecká a další tvůrčí činnost

Vysoká škola	Masarykova univerzita
Součást vysoké školy	Přírodovědecká fakulta
Název studijního programu	Biochemie
Název studijního oborů	Biochemie, Analytická biochemie a Biomolekulární chemie

### Informace o tvůrčí činnosti vysoké školy související se studijním oborem (studijním program)

Ústav biochemie (UB) a Národní centrum pro výzkum biomolekul (NCBR) v současné době řeší 1 projekt OPVK Oblast podpory 2.2 – Vysokoškolské vzdělávání CZ.1.07/2.2.00/15.0233 „Inovace biochemických bakalářských programů Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity pro potřeby moderní společnosti“ - trvání projektu: 1/2011 – 12/2013 a 2 projekty OPVK Oblast podpory 2.3 – Lidské zdroje ve VaV CZ.1.07/2.3.00/09.0137 „Kompaktní školicí centrum strukturní biologie a biomolekulární chemie“ - trvání projektu: 9/2009 – 8/2012 a CZ.1.07/2.3.00/09.0167 „Nanobiotechnologie a biosensory při studiu biointerakcí - zpřístupnění moderní technologie odborníkům v biologii“ - trvání projektu: 1/2011 – 12/2013.

Dále řeší 1 výzkumný záměr – MSM0021622413 Proteiny v metabolismu a při interakci organismů s prostředím (2005 – 2011), jako navrhovatelé dva výzkumná centra – LC06023 Integrované bioanalytické technologie pro mikroanalýzy a diagnostiku s využitím LIF a hmotnostní spektrometrie a LC06030 Biomolekulární centrum (2006-2011).

Mimo výše uvedené se na daných pracovištích řeší 12 projektů GAČR, projekty MŠMT (NPV II, 1 Kontakt, INGO, FRVŠ), 2 projekty Ministerstva zdravotnictví a 1 projekt 7.RP EU. Na výzkumu fakulty se podílí akademičtí pracovníci včetně školitelů, studentů doktorského i magisterského studia. Oba ústavy úzce spolupracují s odbornými pracovišti ostatních vysokých škol i ústavy akademie věd.

Evidence aktuálních projektů a projektů z předchozích období je přístupná na adresách :

[http://www.muni.cz/sci/313050/projects?from\\_record=1](http://www.muni.cz/sci/313050/projects?from_record=1)

<http://ncbr.chemi.muni.cz/fundings.html>

### Přehled řešených grantů a projektů (závazné jen pro magisterské programy)

Pracoviště	Názvy grantů a projektů získaných pro vědeckou, výzkumnou, uměleckou a další tvůrčí činnost v oboru	Zdroj	Období
ÚB	Aktivita acidofilních bakterií oxidujících síru za aerobních a anaerobních podmínek (GA525/08/0697)	GAČR	2008-2011
ÚB	Biomimetic sensors as new generation of biotechnological devices for food safety and quality monitoring (230849)	7. RP EU	2009-2012
ÚB	Capillary electrophoresis as a member of the metabolomic analytical toolbox (GAP206/11/0009)	GAČR	2011-2015
NCBR	Enzymy metabolismu mannosidů v přípravě N-acetyl-mannosaminových struktur (GAP207/10/0321)	GAČR	2010-2013
ÚB	Epidemiologie a genetika Alzheimerovy choroby (NT11152-6/2010)	MZ	2010-2015
NCBR	Interakce protein-sacharid: Podstata rozpoznávání patogenem (SIGA 382)	JMK SoMoPro	2010-2012

## **I – Uskutečňování akreditovaného stud. programu mimo sídlo vysoké školy**

<b>Vysoká škola</b>	Masarykova univerzita
<b>Součást vysoké školy</b>	Přírodovědecká fakulta
<b>Název studijního programu</b>	Biochemie
<b>Název instituce nebo pobočky VŠ, kde probíhá výuka SP mimo sídlo VŠ nebo fakulty</b>	
Výuka veškerých programů je uskutečňována výhradně v sídle vysoké školy.	

## D – Charakteristika studijních předmětů

### Bi5220 Imunologie

**Vyučující:** [doc. RNDr. Antonín Lojek CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět základním principům imunologie.

**Osnova:**

1. Úvod: imunita, specifické a nespecifické mechanismy imunity 2. Anatomie a buněčné prvky imunitního systému a) Primární a sekundární lymfoidní orgány, anatomie a funkce včetně slizničního imunitního systému b) Specifické buňky: ontogeneze, struktura, fenotyp, funkce a aktivace znaky/receptory 3. Imunitní odpověď a) Antigeny: typy, struktura, zpracování, prezentace b) Hlavní histokompatibilní systém: Struktura, funkce a regulace c) Imunogenetika: polymorfismus, vznik diversity a přeskupování genů d) Imunoglobuliny: struktura, funkce a vazba antigenu e) Receptory T-buněk: struktura, funkce a vazba antigenu f) Interakce receptoru s ligandy: adhesivní molekuly, komplementové receptory, Fc receptory a přenos signálu g) Struktura a funkce komplementu h) Nespecifická imunita: reaktanty akutní fáze a zánět 4. Mechanismy přecitlivělosti a) Zprostředkování IgE: časné a pozdní reakce b) Zprostředkovaná IgG, IgA a IgM: opsonizace, vazba komplementu, protilátkami zprostředkovaná buněčná cytotoxicita, stimulace a blokáda c) Zprostředkovaná imunitními komplexy: fyzikálněchemické vlastnosti a clearance d) Zprostředkovaná buňkami: zúčastněné buňky, efektorové mechanismy, tvorba granulomu e) Jiné: NK buňky, zabíječské buňky aktivované lymfokiny, kožní basofilní přecitlivělost 5. Cytokiny a imunomodulátory a) Cytokiny: původ, struktura, účinek, místo působení /receptor), metabolismus, regulace a aktivace genů b) Mediátory zánětu (např. leukotrieny, prostaglandiny, PAF): původ, struktura, účinek, místo působení (receptor), metabolismus a regulace 6. Imunoregulace a) Tolerance: klonální selekce, útlum, antigenní paralýza b) Mezibuněčné interakce: pomoc a útlum (suprese) c) Idiotypová síť: inhibice a stimulace d) Mechanismy autoimunity 6. Transplantační imunologie a) Histokompatibilita: hlavní a vedlejší antigeny a zásady křížení b) Odvrhování štěpu: mechanismy c) Reakce štěpu proti hostiteli: mechanismy 7. Protiinfekční imunita: imunita k virům, bakteriím, houbám, parazitům. 8. Selhání obranných mechanismů, primární a sekundární imunodeficity 9. Nádorová a transplantační imunologie: nádorové znaky: leukémie, lymfomy, zásady protinádorové imunoterapie, onkogeny: translokace a místa zlomu. Imunotoxikologie: mechanismy a nežádoucí účinky xenobiotik, hodnocení in vivo a in vitro imunotoxických látek. c) Klinické aspekty poruch imunity vyvolaných léky a chemickými látkami z prostředí 10. Imunomodulace a) Vakcinace b) Stimulátory buněčné imunity c) Látky získané z bezobratlých d) Látky získané z rostlin e) Enzymoterapie f) Polynukleotidy 11. Základní metody imunologie

**Výukové metody:** Přednášky a prezentace prováděné odborníky na jednotlivé podoblasti imunologie.

**Metody hodnocení:** Písemná zkouška. Závěrečný písemný test se skládá obvykle z 12 otázek hodnocených 30 body. K úspěšnému zvládnutí je potřeba dosáhnout alespoň 16 bodů.

**Literatura:**

- Hořejší, Václav - Bartůňková, Jiřina. *Základy imunologie*. 2.vyd. Praha : Triton, 2002. 260 s. ISBN 80-7254-215-X. info
- *Veterinární imunologie*. Edited by Miroslav Toman. 1. vyd. Praha : Grada, 2000. 413 s. ISBN 80-7169-727-3. info
- Janeway, Charles A. *Immunobiology :the immune system in health and disease*. 6th ed. New York, N.Y. : Garland Science, Taylor & Francis Group, 2005. xxiii, 823. ISBN 0-8153-4101-6. info
- Krejsek, Jan - Kopecký, Otakar. *Klinická imunologie*. 1. vyd. Hradec Králové : NUCLEUS HK, 2004. 941 s. ISBN 80-86225-50-X. info

### Bi7201 Základy genomiky

**Vyučující:** [RNDr. Jan Hejátko Ph.D.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Studenti získají teoretický přehled základních přístupů současné funkční genomiky: Teorie základních bioinformatických nástrojů, základy práce s genomovými databázemi, identifikace genové funkce in silico, cíleným umlčováním genů a přístupy získané funkce, fenotypové profilování (DNA, RNA a proteinové čipy), metody identifikace a analýzy sekvenčně specifických mutantů, fragmentační analýza a poziční klonování, atd.. Přednáška je koncipována jako rozšířený úvod do navazujících praktických cvičení (Bi7201c), v jejichž rámci si budou moci studenti většinu z teoretických poznatků vyzkoušet v praxi. Na konci přednášky získají



studenti přehled o moderních přístupech funkční genomiky. Studenti budou schopni použít a interpretovat informace uložené v genomových databázích, orientovat se v přístupech a problémech moderní biologie a tvůrčím způsobem se účastnit jejího dalšího rozvoje.

**Osnova:**

- Úvod do genomiky.
- Metody funkční genomiky.
- Genomové databáze a základní nástroje bioinformatiky (typy databází, vyhledávání v databázích, vyhledávání podobných sekvencí [BLAST a FASTA], několikanásobné porovnávání sekvencí [CLUSTALW], vyhledávání v genomových databázích Arabidopsis thaliana, lokalizace genů na chromozomu, identifikace a analýza promotorových oblastí jednotlivých genů [ALIBABA], virtuální PCR).
- In silico predikce genové funkce.
- Přístupy přímé a reverzní genetiky (metody získávání a identifikace sekvencně specifických mutantů, sbírky mutantů a jejich analýza, fyzikální a chemická mutagenese, metody cíleného umlčování genů pomocí RNA interference).
- Fragmentační analýza DNA a poziční klonování jako nástroje přímé genetiky.
- Metody identifikace genů pomocí přístupů získané funkce (T-DNA aktivační mutagenese, ektopická exprese, systémy regulovatelné genové exprese).
- Fenotypové profilování (cDNA, RNA a proteinové čipy, metabolické profilování, metody mikrodisekce, proteomické přístupy).
- Southern blot a DNA molekulární hybridizace.
- Identifikace a charakterizace inzerční mutace ve vybraném členu komplexní genové rodiny u Arabidopsis thaliana s využitím vyhledávání založeném na PCR.
- Metody analýzy genové exprese (kvalitativní i kvantitativní metody, analýza exprese pomocí transkripční a translační fúze s reporterovým genem, Genevestigator).
- Nové přístupy: Chemická genetika.

**Výukové metody:** Hlavní výukovou metodou jsou přednášky, obsahující konkrétní příklady vlastní vědecké praxe a demonstrace řešení konkrétních problémů spojených s využitím jednotlivých nástrojů funkční genomiky.

**Metody hodnocení:** Typ výuky: Docházka na přednášky není povinná, ale přítomnost studentů je velice žádoucí pro pochopení principů přístupů funkční genomiky; studijní materiály dostupné on-line jsou spíše doplňkové. Typ závěrečné zkoušky: Písemná zkouška.

**Literatura:**

- Hunt, S.P., Livesey, F.J. (Editors). Functional Genomics : A Practical Approach. Practical Approach Series
- Starkey, M.P., and Elaszwarapu R. (Editors). Genomics Protocols. Methods in Molecular Biology, Vol 175

**Bi8090 Genové inženýrství**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jiří Doškař CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět základním principům přípravy transgenních organismů s využitím metod molekulární biologie při genových modifikacích organismů. Bude schopen vysvětlit, jak se do jednotlivých skupin organismů vnáší nová genetická informace a jak se takto geneticky modifikované organismy využívají ve výzkumu a v praxi.

**Osnova:**

1. Definice genového inženýrství, historie jeho vzniku, jeho význam a perspektivy.
2. Mutagenese in vitro, cílené změny genetického materiálu, náhodná mutagenese, mutagenese pomocí mutagenních oligonukleotidů, kazetová mutagenese, využití supresorových tRNA. Základy proteinového inženýrství.
3. Optimalizace exprese klonovaných genů, faktory ovlivňující expresi genů v cizorodých hostitelích.
4. Klonování genů v grampozitivních organizmech, možnosti jeho využití (Bacillus, Streptomyces). Způsoby přenosu cizích genů do eukaryotických buněk (mikroinjekce, elektroporace, transfekce, vektorové systémy, biologické metody).
5. Obecná charakteristika vektorů pro přenos genů do eukaryot, selekční markery.
6. Klonování genů ve kvasinkách a jeho využití pro analýzu eukaryotického genomu.
7. Klonování genů v rostlinách a jeho využití. Přenos genů pomocí vektorů odvozených od Ti-plazmidu.
8. Klonování genů

v živočišných buňkách.9. Přenos cizích genů do zárodečných buněk (vajíček, embryí) hmyzu, obojživelníků a savců. 9.Navozování cílených změn v genomu živočichů, jeho využití v základním výzkumu a v praxi. 11.Příprava transgenních organismů (transgenoze). 12.Genové terapie, hlavní strategie genové terapie in vitro a in vivo. 13.Využití metod rekombinantní DNA v zemědělství, průmyslu a zdravotnictví. Příprava farmakologicky významných látek v nepřibuzných hostitelích. Příprava látek s novými vlastnostmi (vakcíny, protilátky, enzymy). Klonování živočichů. Rizika přípravy transgenních organismů, pravidla bezpečnosti práce s transgenními organizmy. Etické problémy související s mezidruhovým přenosem genů a přípravou transgenních organismů.

**Výukové metody:** Přednáška je vyučována formou výkladu k powerpointovým předlohám zpracovaných podle učebnic, monografií a článků. Předlohy jsou v průběhu přednášky promítány, vysvětlovány a doplněny komentářem vyučujícího. Předlohy a jsou též k dispozici v IS MUNI.

**Metody hodnocení:** Zkouška je ústní s písemnou přípravou, během níž studenti vypracují odpovědi na 8-10 otázek pokrývajících dílčí tématické okruhy z probírané látky. Během ústní části studenti prokazují schopnost aplikace nabytých poznatků na konkrétních příkladech. K úspěšnému zvládnutí je třeba zodpovědět správně alespoň 70% otázek. Doba trvání zkoušky jednoho studenta je zhruba 60 minut.

**Literatura:**

- Primrose, S. B. - Twyman, Richard M. *Principles of gene manipulation and genomics*. 7th ed. Malden, Mass. : Blackwell Publishing, 2006. xxii, 644. ISBN 1-4051-3544-1. info
- Primrose, S. B. - Twyman, Richard M. *Principles of gene manipulation and genomics*. 7th ed. Malden, Mass. : Blackwell Publishing, 2006. xxii, 644. ISBN 1-4051-3544-1. info

### **Bi8202 Základy proteomiky**

**Vyučující:** [Mgr. Radka Dopitová Ph.D.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Na konci tohoto kurzu bude student schopen: porozumět základům proteomiky vysvětlit principy základních proteomických metod, které jsou náplní následného kurzu (Bi8202c) navrhnout vhodný postup pro různé druhy proteomických experimentů porozumět interpretaci vybraných typů proteomických dat

**Osnova:**

Obecný úvod do proteomiky Rekombinantní proteiny Studium funkce proteinů Struktura proteinů Separace proteinů Vyhodnocení 2-D gelů (image analysis) Analýza proteinů hmotnostní spektrometrií

**Výukové metody:** Hlavní výukovou metodou jsou přednášky, obsahující konkrétní příklady vlastní vědecké praxe jednotlivých přednášejících a demonstrace řešení konkrétních problémů spojených s využitím jednotlivých nástrojů současné proteomiky.

**Metody hodnocení:** Předmět bude vyučován blokově (3 bloky) a ukončen zkouškou. V jarním semestru 2009 bude výuka probíhat ve dnech 20.3., 27.3. a 3.4., vždy od 8.30 do 12.00 na UKB, Kamenice 5, budova A2, seminární místnost 2.11. Řádná zkouška proběhne písemně ve dvou termínech, 24.4. a 30.4., opravný termín pak 7.5., vždy v 9.00. Případné opravné termíny budou vypsány dle potřeby. Upozorňujeme na podmínku absolvování zkoušky pro možnost absolvování navazujících cvičení (Bi8202c).

**Literatura:**

- Wilkins et al. *Proteome Research: New Frontiers in Functional Genomics*. Springer, 1997, ISBN 3-540-62753-7
- Chapman J. R. (Editor). *Mass Spectrometry of Proteins and Peptides*
- Kinter M., Sherman N.E. *Protein Sequencing and Identification Using Tandem Mass Spectrometry* Wiley-Interscience, 2000, ISBN 0471322490

### **Bi8202c Základy proteomiky - cvičení**

**Vyučující:** [RNDr. Jan Hejátko Ph.D.](#)

**Rozsah:** 0/3. 3 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Hlavní cíle kurzu jsou porozumění základním přístupům proteomiky, t.j. strukturální a funkční studium proteinů pomocí technologie rekombinantních proteinů, separace proteinů pomocí různých technik, zejména dvourozměrné elektroforézy a kapalinové chromatografie, a porozumění základním technikám hmotnostní spektrometrie proteinů. Studenti budou schopni praktické aplikace těchto přístupů při řešení současných problémů základního i aplikovaného výzkumu proteinů.

**Osnova:**

- Dvourozměrná elektroforéza proteinů
- Hmotnostní spektrometrie proteinů (MALDI-TOF, LC-MS/MS, příprava a analýza vzorků, identifikace proteinů)
- Příprava, izolace a sekvenace rekombinantní DNA
- Expresce rekombinantní DNA v *E. coli*
- Jedno- a více kroková purifikace rekombinantních proteinů
- Určení čistoty a analýza rekombinantních proteinů
- Western blotting

**Výukové metody:** Praktické řešení úloh demonstřujících využití základních nástrojů současné proteomiky.

**Metody hodnocení:** Ukončení kurzu formou kolokvia. Úspěšné zakončení je podmíněno včasným dodáním všech požadovaných protokolů a absolvováním závěrečného pohovoru.

**Literatura:**

- *Plant proteomics : methods and protocols*. Edited by Herve Thiellement. Totowa, N.J. : Humana Press, 2007. xiii, 399. ISBN 978-1-59745-227. info
- Liebler, Daniel C. *Introduction to proteomics : tools for the new biology*. Totowa, NJ : Humana Press, 2002. ix, 198 s. ISBN 0-89603-991-9. info

**Bi8980 Příprava a charakterizace proteinů I - Expresce a purifikace**

**Vyučující:** [RNDr. Lubomír Janda Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Cílem této přednášky je aby studenti získali základní znalosti o přípravě proteinů v dostatečném množství a kvalitě na krystalizaci, NMR analýzu a pro jiná biochemická měření. Na konci tohoto kurzu bude student schopen: porozumět různým přístupům klonování do různých expresních vektorů s využitím afinitních kotviček i bez a s následnou purifikací těchto rekombinačních proteinů afinitně nebo klasicky; odstranit fúzní protein (kotvičku); uchovat protein v solubilním stavu; detekovat různými metodami proteiny v průběhu purifikačních postupů.

**Osnova:**

1. Molekulární principy pro pochopení vlastností proteinů. 2. Výpočty v molekulární biologii 3. Důležité vlastnosti bílkovin a jak je zkoumat. 4. Klonování DNA. 5. Expresce proteinů. 6. Desintegrace buněk. 7. Fúzní proteiny a afinitní purifikace. 8. Chromatografie pro purifikaci proteinů. 9. Kvalita bílkovin. 10. Analytické metody používané ke studiu proteinů. 11. Značení proteinů. 12. Zvaná přednáška.

**Výukové metody:** Hlavní výukovou metodou jsou přednášky, obsahující konkrétní příklady vlastní vědecké praxe jednotlivých přednášejících a demonstrace řešení konkrétních problémů.

**Metody hodnocení:** Písemný test + ústní zkouška

**Literatura:**

*doporučená literatura*

- *High throughput protein expression and purification : methods and protocols*. Edited by Sharon A. Doyle. [London : Springer, distributor], 2009. xii, 322 p. ISBN 9781588298799. info
- Price, Nicholas C. - Nairn, Jacqueline. *Exploring proteins : a student's guide to experimental skills and methods*. New York : Oxford University Press, 2009. xv, 512 p. ISBN 9780199205707. info
- *Cloning, gene expression, and protein purification : experimental procedures and process rationale*. Edited by Charles Hardin. [1st ed.]. New York : Oxford University Press, 2001. viii, 435. ISBN 0-19-513294-7. info

**CA340 Diplomová práce IV (BC)**

**Vyučující:** [doc. RNDr. Oldřich Janiczek CSc.](#)

**Rozsah:** 0/0/25. 25 kr. Ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Témata vypsána učiteli Ústavu biochemie a Národního centra pro výzkum biomolekul v rozpisech.

**Osnova:**

Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

**Výukové metody:** Samostatná práce studentů pod vedením školitele. Studium odborné literatury, experimentální práce v laboratoři, osobní konzultace s vedoucím práce.

**Metody hodnocení:** Zápočet je udělený za odevzdání práce se souhlasem vedoucího.

**Literatura:**

- Voet, Donald - Voet, Judith G. *Biochemistry*. 3rd ed. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2004. xv, 1591 s. ISBN 0-471-41761-0. info

#### **CB060 Seminář NCBR**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Vladimír Sklenář DrSc.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Individuální prezentace studentů zaměřené na představení výsledků a popis průběhu řešení výzkumných projektů.

**Osnova:**

Aktuální program se mění pro každý semestr a je založen na prezentacích doktorských studentů a zvaných expertů.

'Výukové metody'

**Metody hodnocení:** Zápočet za aktivní účast.

**Literatura:**

- Voet, Donald - Voet, Judith G. *Biochemistry*. 3rd ed. Hoboken : John Wiley & Sons, 2004. xv, 1591 s. ISBN 0-471-39223-5. info

#### **CB070 Proteinová krystalografie**

**Vyučující:** [doc. RNDr. Jaromír Marek Ph.D.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučené ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět a vysvětlit základní principy monokrystalové rtg. strukturní analýzy. Kromě teorie monokrystalové difrakce se zde věnujeme i přístroj. výbavě používané při difrakčním experimentu a metodám používaným při vyhodnocování experimentálních dat. Na předmět CB070 navazuje cvičení CB080.

**Osnova:**

- Symetrie látek. Interakce rtg. záření s látkou
- Difrakce na krystalu
- Zdroje a detektory rtg. záření, Difraktometry
- Fázový problém
- Pattersonovské a přímé metody
- Upřesňování modelu, R-faktory, metoda nejmenších čtverců.
- Programy SHELXS a SHELXL, CNS a CCP4
- Příprava proteinových krystalů
- Proteiny a metody kovových derivátů
- Molekulární nahrazení
- Upřesňování proteinových strukturních modelů
- Krystalografické databáze

'Výukové metody'

**Metody hodnocení:** Během semestru je vyžadována domácí práce na počítači. Zkouška - ústní.

**Literatura:**

- Marek, Jaromír - Trávníček, Z. *Monokrystalová rentgenová strukturní analýza*. první. Olomouc : Vydavatelství Univerzity Palackého, 2002. 169 s. nedělí se na edice. ISBN 80-244-0551-2. info
- Giacovazzo, C. *Fundamentals of Crystallography*. 1992. ISBN 0-19-855578-4. info

### CB080 Proteinová krystalografie - seminář

**Vyučující:** [doc. RNDr. Jaromír Marek Ph.D.](#)

**Rozsah:** 0/1/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Praktické cvičení k přednášce CB070. Na konci tohoto kurzu bude student samostatně zvládnout zpracování synchrotronových difrakčních dat a práci s krystalografickými databázemi, a pochopí i principy práce se systémem CCP4 a mapami elektronové hustoty.

**Osnova:**

- Zdroje a detektory rtg. záření, Difraktometry, plošné detektory
- Program XDS
- Systém CCP4
- Fázový problém, Molekulární nahrazení
- Programy pro MR
- R-faktory, metoda nejmenších čtverců.
- Programy SHELXS a SHELXL, CNS
- Upřesňování proteinových strukturních modelů, mapa elektronové hustoty
- Program Coot
- Krystalografické databáze

'Výukové metody'

**Metody hodnocení:** Během semestru je vyžadována domácí práce na počítači. Zápočet - ústní.

**Literatura:**

- Marek, Jaromír - Trávníček, Z. *Monokrystalová rentgenová strukturní analýza*. první. Olomouc : Vydavatelství Univerzity Palackého, 2002. 169 s. nedělí se na edice. ISBN 80-244-0551-2. info
- Giacovazzo, C. *Fundamentals of Crystallography*. 1992. ISBN 0-19-855578-4. info

### CC060 Seminář NCBR

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Individuální prezentace studentů.

**Osnova:**

Aktuální program se mění pro každý semestr a je založen na prezentacích doktorských studentů a zvaných expertů.

**Výukové metody:** seminar

**Metody hodnocení:** Zápočet za aktivní účast.

**Literatura:**

- Voet, Donald - Voet, Judith G. - Pratt, Charlotte W. *Fundamentals of biochemistry :life at the molecular level*. 3rd ed. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2008. xxx, 1099,. ISBN 978-0-470-12930. info

### C2110 Operační systém UNIX a základy programování

**Vyučující:** [RNDr. Petr Kulhánek Ph.D.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 2 kr. (plus ukončení). Ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Předmět nabízí alternativu k široce rozšířenému prostředí MS Windows. Studenti jsou vedeni k hlubšímu pochopení funkcí programů, které používají, k tvorbě vlastních jednoduchých aplikací. Získané znalosti jsou nezbytným předpokladem pro počítačovou chemii a molekulové modelování a pro případné navazující studium programování v kompilovaných jazycích (C/C++).

**Osnova:**

1. Klastř WOLF (struktura, pravidla používání, správci)
2. Přihlašování (místní a vzdálené přihlášení, export displeje, změna hesla)
3. Programové vybavení (systémové aplikace, vědeckotechnické aplikace)
4. Textové editory (vi, grafické textové editory)

5. Příkazová řádka (terminály, struktura, historie a automatické dokončování)
6. Souborový systém (struktura, absolutní a relativní cesty, práva, speciální soubory, diskové oddíly)
7. Příkazy (manuálové stránky, přehled příkazů)
8. Procesy (procesy, standardní vstup a výstup, přesměrování, roury)
9. Úvod do skriptování (co je to skriptování, výhody a nevýhody, spouštění skriptů)
10. Skriptování v jazyce Bash (proměnné, základní řídicí konstrukce)
11. Skriptování v programu GNUPlot (vykreslování 2D a 3D grafů, interaktivní versus neinteraktivní mód)
12. Skriptování v jazyce AWK (základní konstrukce, jednoduché zpracovávání textových souborů)
13. Použití skriptování při analýze dat (znázornění průběhu výpočtu Gibbsových energií, studentské projekty)

**Výukové metody:** procvičování praktických příkladů, diskuze

**Metody hodnocení:** Kurz probíhá formou cvičení v počítačové učebně - část je věnována přednášce a část praktickému zkoušení práce s UNIXem a skriptování. Účast je povinná (povolené jsou dvě dopředu omluvené absence). V průběhu semestru se uskuteční dva testy (2x 10 bodů). Ve zkouškovém období pak závěrečný test (50 bodů) a samostatné sestavení skriptu (30 bodů). Pro úspěšné zakončení přemětu je zapotřebí získat minimálně 80 bodů.

**Literatura:**

- Hahn, Harley - Norton, Peter. *Průvodce UNIXEM od Petera Nortona : Jak komunikovat s UNIXEM, jak UNIX ukládá a zobrazuje informace, používání unixového systému souborů, práce s editorem vi : Peter Norton's Guide to UNIX (Orig.)*. 1.vyd. Brno : UNIS, 1993. XXIV, 562. info
- Brandejs, Michal. *UNIX - LINUX :praktický průvodce*. 1. vyd. Praha : Grada, 1996. 340 s. ISBN 80-7169-170-4. info
- Petrlík, Lukáš. *Jemný úvod do systému UNIX*. 1. vyd. České Budějovice : Kopp, 1995. 189 s. ISBN 80-85828-28-6. info

### C2135 Bioinformatika v praxi

**Vyučující:** [doc. RNDr. Michaela Wimmerová Ph.D.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 2 kr. (plus ukončení). Ukončení: k.

'Cíle předmětu'

**Osnova:**

- Vyhledávání informací. Vyhledávání informací obecně, databáze biologických dat, instituce pro správu bioinformatických dat
- Sekvenční příložen (sequence alignment). Parametry (gaps, matrix). Příložení genové vs. proteinové sekvence. Repetice. Příložení jako nástroj analýzy sekvenčních dat.
- Predikce genů, proteinů a jejich funkce.
- Design primerů. Význam primerů, základní charakteristiky, tvorba sekundárních struktur, problém chybného nasednutí (false priming), design vlastních primerů.
- Klonování a restriční štěpení.
- Predikce vlastností proteinů. Co lze predikovat, srovnání náročnosti a spolehlivosti experimentu a výpočtu.
- Samostatný projekt: identifikace potenciálních genů důležitých pro virulenci v genomu neznámého organismu a určení funkce kódovaných proteinů.
- Praktická úloha 1. Polymerázová řetězová reakce a elektroforéza v agarosovém gelu.
- Praktická úloha 2. Izolace produktu PCR, štěpení restričními endonukleasami.

'Výukové metody"Metody hodnocení"Literatura'

### C3200 Chemická literatura

**Vyučující:** [doc. RNDr. Ctibor Mazal CSc.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Kurz uvádí do základních postupů; získávání informací v chemii. Seznamuje se hlavními primárními, sekundárními a terciárními zdroji chemických informací a s postupy a možnostmi praktického provádění rešerší. Podrobněji jsou probrány hlavní on-line zdroje dostupné na fakultě: produkty ISI (Web of Science), CAS (SciFinder) Beilsteinovo a Gmelinovo kompendium (CrossFire - Beilstein Commander), a základní možnosti využití internetu při získávání chemických informací. Hlavní postupy jsou procvičovány prakticky.



## Osnova:

1. Zdroje chemických informací. Primární, sekundární a terciární literatura. Typy dokumentů. Obecná strategie rešerše. 2. Produkty ISI. Current Contents, Scientific Citation Index. Citační analýza. Seznámení s Web of Science.
2. Chemical Abstracts. Členění abstract, struktura abstraktu, indexy CA. Možnosti rešerše v CA, SciFinder a STN.
3. Beilsteins Handbuch der organischen Chemie. Struktura a vnitřní systém databáze. Beilstein commander, online přístup pomocí CrossFire.
4. Praktické provádění rešerše pomocí CrossFire.
5. Online přístup k primárním zdrojům. Elektronické časopisy, Science direct a podobné přístupy. Patentová literatura, DEPATIS - příklad elektronické databáze.
6. Katalogy knihoven - přístup přes Internet.
7. Získávání chemických informací na Internetu. ChemWeb a další chemické metastránky.
8. Praktické procvičení vyhledávání informací dostupnými prostředky.
9. Základní zdroje informací v anorganické chemii. Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie, struktura databáze, elektronický přístup pomocí Beilstein commanderu a CrossFire.
10. Přístup a možnosti databází CCDC (The Cambridge Crystallographic Data Center).
11. Základní zdroje informací v biochemii, seznámení se základními biochemickými časopisy, periodiky, příručkami a učebnicemi, jejich dostupnost v tuzemsku.
12. Provádění rešerši v dostupných databázích (Medline a d.), biochemické informace na Internetu, nejdůležitější místa, praktické ukázky: [http://orion.chemi.muni.cz/pskl/vyuka/biochem\\_info.html](http://orion.chemi.muni.cz/pskl/vyuka/biochem_info.html)
13. Základní zdroje informací v chemii životního prostředí.

## Výukové metody: Přednášky

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška ověří praktické dovednosti při využití dostupných on-line prostředků (SciFinder Scholar, Web of Science, CrossFire Commander).

## Literatura:

- Vymětal, Jan. *Odborná literatura a informace v chemii*. 1. vyd. Praha : Orac, 2001. 377 s. ISBN 80-86199-33-9. info
- Šilhánek, Jaroslav. *Úvod do chemické informatiky*. 1. vyd. Praha : VŠCHT, 1994. 151 s. ISBN 80-7080-218-9. info
- Klán, Petr. *Chemická informatika : úvod do používání Internetu*. Praha : Ústav informatiky Akademie věd ČR, 1999. 1 svazek (. ISBN 80-86238-01-6. info

## C4300 Chemie životního prostředí I - Environmentální procesy

**Vyučující:** [prof. RNDr. Ivan Holoubek CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Po absolvování kurzu budou studenti rozumět globálním problémům lidstva a životního prostředí. Budou chápat souvislosti mezi strukturou chemických látek, jejich fyzikálně-chemickými vlastnostmi a jejich osudem v prostředí a vlivu vlastností prostředí na tento osud. Studenti získají schopnost interpretovat osud chemických látek v prostředí, jejich transport v prostředí, mezifázové přechody, rovnováhy v prostředí a transformace chemických látek v abiotických a biotických složkách prostředí.

## Osnova:

- Koncepce výuky chemie životního prostředí. Globální problémy lidstva a životního prostředí. Stav ŽP v ČR.
- Chemické látky v prostředí – základní pojmy a definice.
- Environmentálně nebezpečné chemické látky. Osud chemických látek v prostředí.
- Složky prostředí, základní charakteristiky. Ekosystémy – definice, vztahy. Biogeochemické cykly – základní pojmy. BGC cyklus uhlíku, dusíku, síry, fosforu, mikrobiogenních prvků a toxických kovů. Osud chemických látek v prostředí – transport, transformace – základní pojmy a vztahy. Environmentální rozhraní a chemická rovnováha.
- Parametry charakterizující vlastnosti látek a vlastnosti prostředí. Tenze par. Rozpustnost ve vodě. Rovnováha organická fáze – voda. Rozdělovací koeficient n-oktanol-voda. Organické kyseliny a báze, konstanty acidity a rozdělovací chování. Persistence v prostředí. Chiralita látek. Výskyt chirálních látek v prostředí a jejich osud. Vztahy mezi strukturou chemických látek a jejich reaktivitou.

- Transport chemických látek v prostředí. Transport v ovzduší, ve vodách, půdách a biotě. Difuze. Fickovy zákony. Disperze, advekce, depozice, vytékávání, sedimentace, fázové rozdělení, vymývání, biopříjem, eliminace.
- Abiotické environmentální rovnováhy. Rovnováha vzduch-voda, těkání, Henryho zákon. Rovnováha vzduch-aerosol. Rovnováha vzduch-půda. Rovnováha vzduch-biota. Rozdělovací koeficient n-oktanol-vzduch. Suchá a mokrá atmosférická depozice. Sorpce. Rovnováha voda-tuhá fáze (sediment, suspendované sedimenty, půda). Vymývání půd, odnos půd.
- Biotické environmentální rovnováhy. Bioakumulace. Bioobohacování, příjem potravou, příjem ze sedimentů, kombinovaný příjem z vody, potravy a sedimentů. Akumulace v terestrických rostlinách, příjem kořeny, foliární příjem. Akumulace v terestrických bezobratlých. Abiotické transformace chemických látek. Nereduktivní chemické reakce zahrnující nukleofilní skupinu. Oxidační a redukční reakce. Fotochemické transformační procesy.
- Biotické transformace chemických látek. Biodegradace, typy biodegradčních reakcí, aerobní biodegradace a metabolické mechanismy, anaerobní biodegradace, kinetika biodegradace. Biotransformace, vlivy biotransformací na xenobiotika, fáze biotransformačních procesů.
- Účinky chemických látek. Přehled, mechanismy.
- Modely distribuce chemických látek v prostředí.
- Environmentální databáze a informační systémy. Integrovaný registr znečištění.
- Mezinárodní úmluvy a aktivity zaměřené na chemické látky v prostředí.
- Nové přístupy v chemii. Zelená chemie, chemie pro udržitelný rozvoj.
- Konceptní přístupy v environmentální analytické chemii, význam odběrů vzorků, ultrastopová analýza, monitoring chemických látek v prostředí.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** Písemný test a ústní zkouška

**Literatura:**

- *Risk assessment of chemicals :an introduction.* Edited by C. J. van Leeuwen - T. G. Vermeire. 2nd ed. Dordrecht : Springer, 2007. xxxii, 686. ISBN 978-1-4020-6101. info
- *Environmental chemistry in society.* Edited by James M. Beard. Boca Raton : Taylor & Francis, 2009. xvii, 345. ISBN 978-1-4200-8025. info
- Schwarzenbach, René P. - Gschwend, Philip M. - Imboden, Dieter M. *Environmental organic chemistry.* 2nd ed. Hoboken, N.J. : Wiley-Interscience, 2003. xiii, 1313. ISBN 0-471-35750-2. info
- *Environmental chemistry :fundamentals.* Edited by Jorge G. Ibanez. New York, NY : Springer, 2007. xviii, 334. ISBN 978-0-387-26061. info
- *The handbook of environmental chemistry.* Edited by O. Hutzinger. Berlin : Springer-Verlag,. info
- *Elements of environmental chemistry.* Edited by Ronald A. Hites. Hoboken, N.J. : Wiley-Interscience, 2007. xiii, 204. ISBN 978-0-471-99815. info
- Manahan, Stanley E. *Environmental chemistry.* 8th ed. Boca Raton, Fla. : CRC Press, 2005. 783 s. ISBN 1-56670-633-5. info
- vanLoon, Gary W. - Duffy, Stephen J. *Environmental chemistry :a global perspective.* 1st publ. Oxford : Oxford University Press, 2000. xi, 492 s. ISBN 0-19-856440-6. info
- Howard, Alan G. *Aquatic environmental chemistry.* New York : Oxford University Press, 1998. vi, 90 s. ISBN 0-19-850283-4. info

### **C4310 Chemie životního prostředí II - Zdroje znečištění, složky prostředí a jejich znečištění - technosféra, atmosféra**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Ivan Holoubek CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu: Na konci tohoto kurzu bude student schopen:** - charakterizovat vlastnosti jednotlivých složek životního prostředí (atmosféra, hydrosféra, pedosféra, biosféra) a kombinovat tuto znalost s výskytem a osudem chemických látek v těchto složkách - rozumět problémům souvisejícím s jejich znečišťováním z přírodních i antropogenních zdrojů - vysvětlit souvislosti mezi zdroji znečišťování a primárním i sekundárním znečištěním jednotlivých složek prostředí - charakterizovat a diskutovat důsledky znečištění pro stav životního prostředí a zdraví lidí

**Osnova:**



- Atmosféra – základní charakteristiky – složení, teplotní stratifikace atmosféry, tlak vzduchu, energetická bilance, teplota vzduchu, teplotní gradienty.
- Atmosférické aerosoly, dělení dle skupenství, původu, vzniku, velikosti, účinku, složení. Vlastnosti. Mechanismy atmosférického propadu.
- Znečištění atmosféry, atmosférické reakce, příklady, reakce s OH radikály.
- Síra v atmosféře, formy výskytu, biogenní a antropogenní sloučeniny. Oxid siřičitý.
- Dusík v atmosféře, formy výskytu, mechanismus tvorby NO<sub>x</sub>.
- Uhlík v atmosféře, oxid uhelnatý, oxid uhličitý, skleníkový efekt, uhlovodíky v atmosféře.
- Ozon v atmosféře, význam, vznik a rozklad, vznik ozonu v přízemních vrstvách atmosféry, ozónová vrstva a působení UV záření.
- Fluorovodík, olovo, tuhé částice v atmosféře. Další příklady látek znečišťujících atmosféru.
- Acidifikace prostředí. Mechanismy okyselování depozice. Vlivy acidifikace na vodu a vodní ekosystémy, půdu, vegetaci, lesy, stavby a jiná zařízení a na zdraví člověka.
- Smog – fotochemický, redukční.
- Zákon o čistotě ovzduší, mezinárodní konvence o ochraně ovzduší.
- Hydrosféra, základní charakteristiky, voda a její vlastnosti, hydrologický cyklus.
- Senzorické vlastnosti vod, pH vody, vodivost, redox potenciál, rozpustnost ve vodě.
- Chemické reakce ve vodách, hydrolytické reakce, rovnováhy ve vodách (protolytické, komplexotvorné, srážecí, rozpouštěcí, redox)
- Chemické složení vod, anorganické ionty, tlumivá a neutralizační kapacita, radionuklidy ve vodách, organické látky – fenoly, huminové látky.
- Dnové sedimenty, vznik, rovnováha voda-sediment, sedimentace, sorpce na povrchu sedimentů.
- Samočišticí schopnost vody, kyslíkové poměry v tocích a nádržích, chemická a biochemická spotřeba kyslíku.
- Znečištění vod – primární, sekundární.
- Typy vod – odpadní, atmosférické, podzemní, povrchové, pitné.
- Znečištění vod – kovy ve vodách, živiny ve vodách, radioaktivní znečištění, eutrofizace vod, organické polutanty ve vodách – fenoly, ropné znečištění, pesticidy, detergenty, halogenderiváty.
- Pedosféra – vznik půdy, složky půdního systému, humus, genetické horizonty, sorpční kapacita, zvětrávání, transport a reakce chemických látek v pedosféře, chemické složení půd.
- Znečištění půd – primární, sekundární, kovy, živiny, organické polutanty.
- Biosféra – základní charakteristika, expozice organismů, její důsledky.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** Písemný test a ústní zkouška

**Literatura:**

- Stumm, Werner - Morgan, James J. *Aquatic chemistry :chemical equilibria and rates in natural waters*. 3rd ed. New York : John Wiley & Sons, 1995. xvi, 1022. ISBN 0-471-51185-4. info
- J. H. Seinfeld, S.N. Pandis: Atmospheric chemistry and physics. ISBN: 0-471-17816-0

#### **C4840 Metody značení a imobilizace biomolekul**

**Vyučující:** [doc. RNDr. Petr Skládal CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (plus ukončení). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Modifikace biomolekul jejich vzájemným spojováním, zaváděním vhodných značek nebo navázáním na povrchy polymerních matric a sensorů jsou základem řady moderních vědeckých metod, bioanalytických procesů a terapeutických postupů. Nejprve budou probrány vhodné povrchové skupiny bílkovin, nukleových kyselin a sacharidů, využitelné pro (bio)konjugační reakce. Další část se zaměří na nejdůležitější činidla používaná pro konjugační reakce (zesíťování) a vnášení nejrůznějších značek (fluorescenční, enzymové, biotinylace, liposomy, nanočástice). Budou probrány postupy aktivace inertních povrchů (polymery, sklo, ušlechtilé kovy, uhlík) před vlastní vazbou biomolekul. Stručně budou zmíněny metodiky charakterizace biokonjugátů (určení stupně substituce). Závěrečná část pak přinese příklady typických aplikací vznik haptenukonjugačních konjugátů, značení protilátek a antigenů enzymy, přípravu nosičů pro afinitní chromatografii, imobilizace enzymů na povrch sensorů, výrobu proteinových a DNA biočipů.

**Osnova:**

1. Modifikace proteinů a peptidů postranní řetězce aminokyselin, prosthetické skupiny.
2. Funkční skupiny nukleotidů, modifikace DNA a RNA. Modifikace (poly)sacharidů a glykokonjugátů.
3. Vnášení nových

reaktivních skupin do biomolekul. Chemické reakce vybraných skupin. 4. Biokonjugační reakce, homo- a heterobifunkční zesilující činidla. Štěpitelné můstky. 5. Fluorescenční značky fluorescein, rhodamin, kumariny; rezonanční přenos FRET. 6. Biotinylace, chelatační skupiny, histidinové skupiny, boronátové komplexy. Radioaktivní značení. Liposomy, nanočástice. 7. Enzymové značky peroxidasa, alkalická fosfatasa, galaktosidasa, gluksoxidasa. Metodiky značení a detekce aktivity. 8. Imobilizace biomolekul v afinitní chromatografii. Aktivace agarosových a celulosových matic, použití polymerních materiálů akrylamid, methakrylát, polystyren; porézní skleněné materiály. 9. Aktivace inertního povrchu sensorů vnášením reaktivních skupin zlato, platina, uhlík. Monovrstvy thiosloučenin, silanizace. Fotoaktivace a strukturace vrstev biomolekul. 10. Metody charakterizace biokonjugátů. Určování stupně substituce. Stanovení povrchové hustoty imobilizovaných biomolekul. 11. Aplikace: Příprava konjugátů haptenu s nosnými proteiny, značení protilátek enzymy a fluorofory. Značení proteinů koloidním zlatem. 12. Imobilizace proteinů na povrch zlata. Imobilizace souborů oligonukleotidových průb na DNA biočipy.

**Výukové metody:** přednáškový kurz

**Metody hodnocení:** zkouška

**Literatura:**

- Hermanson, Greg T. *Bioconjugate techniques*. San Diego : Academic Press, 1995. xxv, 785 s. ISBN 0-12-342336-8. info

## C5020 Chemická struktura

**Vyučující:** [doc. RNDr. Pavel Brož Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Na konci kurzu bude student schopen použít znalostí základních spektroskopických metod (hmotnostní spektrometrie, difrakční analýza, IČ spektroskopie, NMR atd.) k identifikaci chemické struktury. Bude schopen navrhnout vhodný postup ke studiu chemických látek a interpretovat získané údaje.

**Osnova:**

1. Difrakce elektronů a rtg. záření . Elektronů jako částice i záření, kvantová čísla, difrakce na souboru rovin (Huygensova a Ewaldova konstrukce), přímá a reciproká mřížka, interference (Laueho a Braggova metoda), radiální distribuční funkce (Wierlova rovnice). 2. Absorpce elektronů a gama záření. Hmotnostní spektrometrie (metody ionizace, rozlišení a detekce, skupina molekulového píku, hlavní typy fragmentace). Moessbauerova spektroskopie (isotopový posun, kvadrupolové štěpení). 3. Fotoelektronová spektroskopie. Absorpce rtg. fotonu (XPS, ESCA), elektronu (Auger) a UV kvanta (UPS). Rtg. fluorescence. 4. Absorpce UV a vis. záření. Elektronová spektroskopie, (Franckův-Condonův princip, vibrační a rotační struktura energetických diagramů) termická relaxace, fluorescence, fosforescence (typy elektronových přechodů, částice v jednorozměrné potenciálové jámě, chromofory, auxochromy, posuny absorpcí vnějšími a vnitřními vlivy). Využití elektronové spektroskopie ve strukturní a kvantitativní analýze (Lambertův-Beerův zákon). 5. Molekuly v elektrickém poli (polarizovatelnost, indukovaný a permanentní dipolový moment, permitivita dielektrika). Polarizace indukovaná a orientační, Clausius-Mossottiho a Debyeova rovnice. Měření dipolových momentů (Halverstadt-Kumlerova metoda, Gugenheim-Smithova metoda). Index lomu a molární refrakce. 6. Molekuly v elektrickém poli světelné vlny. Rayleighův a Ramanův rozptyl, Ramanova spektroskopie (anisotropie polarizovatelnosti, depolarizace, Stokesovy a antistokesovy přechody, Ramanova spektra vibrační a rotační). 7. Absorpce IR a MW záření. IR spektra vibrační (harmonický a anharmonický oscilátor, energie vibračních hladin, typy normálních vibrací). Přechody mezi vibračními energetickými hladinami (NIR spektroskopie v kvalitativní a kvantitativní analýze). Spektra vibrační, rotační a rotační (tuhý a elastický rotor, rotační distorsní konstanta). 8. Přechod světla látkami. Lom světla (Snellův zákon, měření indexu lomu, závislost na vlnové délce, hustotě). Vliv elektrického pole (Kerrův efekt, Kerrův faktor a konstanta a jejich využití ve strukturní analýze). 9. Optická aktivita (specifická otáčivost, závislost na vlnové délce, Drudeova rovnice, Cottonův efekt, optická rotační disperse, cirkulární dichroismus). Optická otáčivost a struktura (absolutní hodnota, oktantové pravidlo). 10. Molekuly v magnetickém poli. (Magnetická indukce, magnetizace, anisotropie magnetické susceptibility. Dielektrika, paramagnetika, ferromagnetika (Curieův zákon, Weissova korekce, Curieova teplota). 11. Elektronová paramagnetická rezonanční spektroskopie. Elektron v magnetickém poli, podmínka resonance, Landého g-faktor, Hyperjemné štěpení - multiplicita signálů. 12. Nukleární magnetická rezonanční spektroskopie. Chování jader v magnetickém poli, jaderný spin, kvantová čísla, podmínka resonance, stínící konstanta (substituční, sterická a solvatační složka). Spin-spinová interakční konstanta, postupná redukce multipletů, počet NMR signál a symetrie molekuly, intenzita signál a využití v kvantitativní analýze.

**Výukové metody:** Teoretická příprava v oblasti spektroskopických metod pro identifikaci chemické struktury spojená s výpočtovým seminářem s praktickými výstupy.

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška, předpokladem je zápočet ze semináře.

**Literatura:**

- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info

### C5120 Počítače v chemii a chemometrie

**Vyučující:** [RNDr. Marta Farková CSc.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (plus ukončení). Doporučované ukončení: k. Jiná možná ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Cílem předmětu je seznámit studenty se způsoby zpracování experimentálních dat.

**Osnova:**

1. Odhady základních metrologických charakteristik výsledků. 2. Testování metrologických vlastností výsledků. 3. Určování matematického modelu a jeho parametrů, regrese. 4. Lineární regrese. 5. Metody obecné regrese, minimalizace funkcí. 6. Absolutní a relativní chyba. Základní zdroje chyb. Vyjádření chyby v obecném tvaru. 7. Přibližné řešení algebraických a transcendentních rovnic. Numerické řešení systémů lineárních algebraických rovnic. Numerické integrování funkcí. 8. Interpolace funkcí. Numerické derivování. Přibližné řešení diferenciálních rovnic. Metoda Monte Carlo. 9. Plánování pokusů. 10. Faktorová analýza. 11. PLS. 12. Umělé neuronové sítě.

**Výukové metody:** Typ výuky: přednášky, diskuse v hodině

**Metody hodnocení:** Typ zkoušky: písemná a ústní zkouška

**Literatura:**

- Pytela, Oldřich. *Chemometrie pro organické chemiky*. 3. přeprac. vyd. Pardubice : Univerzita Pardubice, 2000. 199 s., 26. ISBN 80-7194-309-6. info

### C5300 Statistická termodynamika

**Vyučující:** [prof. RNDr. Mojmir Šob DrSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Obsah předmětu lze shrnout do těchto kapitol: Molekulární stavy a jejich distribuce. Boltzmannovo rozdělení a partiční funkce. Vztah termodynamických vlastností k partiční funkci. Vnitřní energie a entropie ideálního plynu. Kanonický soubor a kanonická partiční funkce pro různé módy pohybu a její výpočet ze spektroskopických dat. Rovnovážná konstanta. Statistická termodynamika reálných plynů a tekutin. Statistická termodynamika směsí: model regulárního roztoku. Statistická termodynamika ideálního krystalu: modely Einsteinův a Debyeův. Adsorpce. Fluktuace. Cílem je vysvětlit základní pojmy statistické termodynamiky a nastínit možnosti jejich uplatnění v chemii.

**Osnova:**

1. Statistická termodynamika a molekulární stavba hmoty. Postuláty statistické termodynamiky. Konfigurace a váha stavu. Populace stavu. Nejpravděpodobnější konfigurace. Metoda Lagrangeových součinitelů, Boltzmannovo rozdělení populací. 2. Molekulární partiční funkce a její interpretace. Molekulární partiční funkce harmonického oscilátoru. Výpočet populace stavu. Translační partiční funkce. 3. Vnitřní energie a entropie ve statistické termodynamice. Vnitřní energie a partiční funkce. Výpočet měrného tepla při stálém objemu. Vnitřní energie ideálního plynu. Boltzmannův vztah pro entropii. Výpočet entropie souboru oscilátorů. 4. Kanonická partiční funkce. Mikrokanonický, kanonický a grand-kanonický soubor. Partiční funkce kanonických souborů. Výpočet vnitřní energie a entropie pomocí kanonické partiční funkce. Porovnání statis-tických a termodynamických veličin. Partiční funkce ideálního plynu. 5. Entropie jednoatomového plynu. Sackurova-Tetrodeova rovnice. Fyzikální statistiky. 6. Chemické aplikace statistické termodynamiky. Výpočet Gibbsovy energie z partiční funkce. Příspěvky k partiční funkci: translační, vibrační, rotační a elektronový. 7. Střední hodnota energie. Rotační a vibrační teplota. Ekvipartiční princip. Výpočet tepelné kapacity plynů. 8. Statistické vyjádření chemické rovnováhy. Výpočet rovnovážné konstanty reakce pomocí partičních funkcí reaktant a produktů. 9. Statistická termodynamika reálného plynu. Párové potenciály. Konfigurační integrál. Termodynamické funkce při párových interakcích. Tvorba klastrů. Viriální koeficienty. Reziduální entropie. 10. Statistická termodynamika kapalin. Buňková teorie kapalin a stlačených plynů. Kritické veličiny. Teorem korespondujících stavů. Koncepce volného objemu kapalin.

Výpočet tlaku nasycených par. Distribuční funkce v jednoatomových kapalinách. Radiální korelační funkce. 11. Statistická termodynamika krystalu. Einsteinův a Debyeův model. Charakteristické teploty. Fonony. 12. Vibrační a konfigurační entropie. Model regulárního roztoku. Mřížková teorie roztoků polymerů (Flory-Huggins). Adsorpce. 13. Fluktuace částic a termodynamických veličin. Statistika výskytu fluktuací. Fluktuace energie a termodynamických proměnných. Brownův pohyb. Souvislost mezi chemickou rovnováhou a chemickou kinetikou. Spontánní organizace v systémech.

**Výukové metody:** Teoretická příprava zaměřená na praktické aplikace ve výpočtech fázových diagramů.

**Metody hodnocení:** Výuka probíhá týdně, ukončení je ústní zkouškou. Příklady počítají studenti jako domácí úkoly, kontrola probíhá při přednáškách.

**Literatura:**

- Atkins, P. W. *Physical chemistry*. 5th ed. Oxford : Oxford University Press, 1994. 1031 s. ISBN 0-19-269042-6. info
- Boublík, Tomáš. *Statistická termodynamika*. Vyd. 1. Praha : Academia, 1996. 199 s. ISBN 80-200-0566-8. info

### C5320 Fyzikálně chemické základy NMR

**Vyučující:** [prof. RNDr. Vladimír Sklenář DrSc.](#), [doc. RNDr. Radovan Fiala CSc.](#)

**Rozsah:** 2/1/0. 3 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Úvod do spektroskopie nukleární magnetické rezonance. Popis základních principů s využitím klasického vektorového modelu s navazující rigorózní analýzou využívající kvantové mechaniky. Teorie matic hustoty a součinnový operátorový formalismus jsou použity pro základní popis experimentů NMR ve více dimenzích. Získané vědomosti umožňují základní orientaci v moderních metodách NMR spektroskopie využívaných v organické a anorganické chemii, biochemii a metodách moderní strukturní biologie a biofyziky.

**Osnova:**

1. Úvod: Historie NMR spektroskopie a současné trendy - využití NMR to ke studiu molekulární struktury v kapalně a pevné fázi, NMR tomografie a NMR zobrazování, pohledy do budoucna, prohlídka NMR laboratoře PřF MU. 2. Základní principy: magnetický dipól, rezonanční podmínka, NMR spektrometr, Fourierova spektroskopie, klasický popis - Blochovy rovnice, relaxační procesy - spin-mřížková a spin-spinová relaxace, Fourierova transformace, citlivost měření. 3. Dynamika spinových systémů: základní vlastnosti nukleárního spinového systému, teorie matic hustoty, maticové reprezentace, operátory, spinový Hamiltonián v Hilbertově reprezentaci, teorie průměrného Hamiltoniánu. 4. Součinnový operátorový formalismus: základní principy, názvosloví, vývoj součinnových operátorů, Hamiltonián v součinnové bázi, složené rotace, pozorovatelné veličiny. 5. 1D Fourierova spektroskopie: excitační sekvence, principy spinového echa, měření relaxačních časů, přenos polarizace, metody INEPT a DEPT, složené pulzy, homo- a hetero-nukleární decoupling, pulzní gradienty. 6. 2D Fourierova spektroskopie: základní principy a formální teorie detekce NMR ve dvou frekvenčních dimenzích, koherenční stezky. 7. Základní metody 2D spektroskopie: korelace chemických posunů - COSY, J-rozlišená spektroskopie, měření spin-spinových skalárních interakcí, korelace dipól-dipólových interakcí - NOESY spektroskopie, fázové cykly, varianty pro měření homo- a hetero-nukleárních spinových systémů, editace spekter. 8. Aplikace NMR ve strukturní analýze biomolekul: proteiny a peptidy, nukleové kyseliny, získávání strukturních parametrů: měření vzdáleností vodíkových atomů, určování dihedrálních úhlů, matematická rekonstrukce prostorové struktury makromolekul.

**Výukové metody:** Přednášky a cvičení

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška

**Literatura:**

- *Understanding NMR spectroscopy*. Edited by James Keeler. Chichester : Wiley, 2005. xv, 459 p. ISBN 9780470017876. info
- *Protein NMR spectroscopy principles and practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info
- *NMR and the periodic table*. Edited by Robin Kingsley Harris - Brian E. Mann. London : Academic Press, 1978. 459 s. ISBN 0-12-327650-0. info
- Cavanagh, John - Fairbrother, Wayne J. *Protein NMR Spectroscopy. Principles and Practice*. San Diego : Academic Press, 1996. 587 s. ISBN 0-12-164490-1. info

- *Two-dimensional NMR spectroscopy :applications for chemists and biochemists*. Edited by William R. Croasmun - Robert M. K. Carlson. 2nd ed. New York : VCH Publishers, 1994. xxii, 958. ISBN 1-56081-664-3. info
- Sanders, Jeremy K. M. *Modern NMR spectroscopy :a workbook of chemical problems*. 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 1993. 127 s. ISBN 0-19-855812-0. info
- Evans, Jeremy N. S. *Biomolecular NMR spectroscopy*. Oxford : Oxford University Press, 1995. xvi, 444 s. ISBN 0-19-854766-8. info
- Hoch, Jeffrey C. - Stern, Alan S. *NMR data processing*. New York : Wiley-Liss, 1996. xi, 196 s. ISBN 0-471-03900-4. info
- Hore, Peter J. - Jones, Jonathan A. - Wimperis, Stephen. *NMR :the toolkit*. 1st pub. Oxford : Oxford University Press, 2000. 85 s. ISBN 0-19-850415-2. info
- Rahman, Atta-ur-. *One and Two Dimensional NMR Spectroscopy*. 1. vyd. Amsterdam : Elsevier Science Publishers B.V., 1989. 578 s. ISBN 0-444-87316-3. info
- Ven, Frank J. M. van de. *Multidimensional NMR in Liquids :basic principles and experimental methods*. New York : VCH Publishers, 1995. 399 s. ISBN 1-56081-665-1. info

### C5340 Nerovnovážné systémy

**Vyučující:** [prof. RNDr. Igor Kučera DrSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Studenti by měli získat elementární představu o možnostech aplikace nerovnovážné termodynamiky a fenomenologické kinetiky při popisu procesů v (bio)chemických systémech. Detailní znalosti používaného matematického aparátu nebudou požadovány, důraz bude kladen na pochopení podstaty problémů.

**Osnova:**

- Úvod do termodynamiky nevratných procesů 1. Produkce entropie 2. Fenomenologické rovnice a Onsagerovy reciproční vztahy 3. Evoluční kritéria a stabilita stacionárních stavů 4. Řešení vybraných úloh
- Termodynamická analýza spřažených procesů 1. Přeměna energie 2. Osmoza a elektrokinetické jevy 3. Termoelektrické jevy
- Matematické modelování nelineárních dynamických systémů 1. Základní pojmy; atraktory 2. Bifurkace 3. Vznik prostorových struktur 4. Oscilující reakce Belousova a Žabotinského 5. Analýza řízení metabolismu 6. Prebiotická evoluce

**Výukové metody:** Přednášky s demonstracemi

**Metody hodnocení:** Jednosemestrová přednáška v rozsahu 2 hod týdně. Zahrnuje i počítačové modelování a praktickou demonstraci oscilující reakce. Základem zkoušky (kolokvia) je písemný test.

**Literatura:**

*doporučená literatura*

- Fischer, Oldřich - Kučera, Igor. *Nerovnovážné soustavy : termodynamika nevratných chemických a buněčných procesů*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1987. 154 s. info
- Atkins, Peter William. *Physical chemistry*. 6th ed. Oxford : Oxford University Press, 1998. 1014 s. +. ISBN 0-19-850101-3. info
- Coveney, Peter V. - Highfield, Roger. *Šíp času : cesta vědou za rozluštěním největší záhady lidstva*. 1. vyd. Ostrava : Oldag, 1995. 472 s., [1. ISBN 80-85954-08-7. info
- Gleick, James. *Chaos : vznik nové vědy*. Translated by Jaroslav Sedlář - Renata Kamenická. [1. vyd.]. Brno : Ando Publishing, 1996. 349 s. ISBN 80-86047-04-0. info

### C5850 Biofyzikální chemie I

**Vyučující:** [doc. RNDr. Libuše Trnková CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** 1. Strategie a taktika biofyzikální chemie (strategické přístupy BFCH, strukturální úroveň biomakromolekul, úloha CO<sub>2</sub> a vody) 2. Problémy prostorových struktur biopolymerů (terciární a kvartérní struktura biopolymerů, stabilita helikálních struktur, vodíková a disulfidická vazba, nekovalentní interakce, denaturace, ionizace řetězců) 3. Interakce biologických molekul s elektromagnetickým zářením (absorpční elektronová, fluorescenční a IČ spektroskopie, optická aktivita, rozptyl světla, rezonanční metody) 4. Rozměr a tvar makromolekul (elektronová mikroskopie, hydrodynamické metody, difúze, sedimentace a rentgenová difrakce) 5. Termodynamika biologických systémů (1) (ireverzibilní procesy, statistická interpretace entropie, produkce entropie, problém standardního stavu, ideální, regulární a neregulární roztoky, vícesložkové systémy, disipativní struktury) 6. Termodynamika biologických systémů (2) (problémy termodynamiky biologických



procesů, formalismus nerovnovážné fenomenologické termodynamiky, energetika procesu vývoje a regenerace) 7. Chování makromolekul v roztoku (statistické zpracování roztoků polymerů, Hugginsova-Floryho koncepce, dialyzační rovnováha a osmotický tlak polymerní složky, teorie Donnana a Scatcharda, statistické klubko) 8. Polyelektrolyty (teorie PEL při limitních koncentracích, rozdělení protiiontů a jejich interakce s polyiontem, aktivity protiiontů, expanze polyiontů, termodynamické, transportní a elektrické vlastnosti PEL, modely PEL) 9. Kinetika v biologických systémech (kinetické procesy s více substráty a s více meziproducty, katalýza, inhibice, regulace, biologické hodiny) 10. Polarografie a voltametrie v biologických systémech (využití polarografických a voltametrických technik k výzkumu a stanovení proteinů, NK a jejich složek, analýza molekul farmaceutického významu) 11. Procesy přenosu elektronů a iontů v biologických systémech

#### **Osnova:**

Strategie a taktika biofyzikální chemie. Problémy prostorových struktur biopolymerů. Interakce biologických molekul s elektromagnetickým zářením. Rozměr a tvar makromolekul. Termodynamika biologických systémů. Statistické zpracování roztoků polymerů. Chování makromolekul v roztoku. Polyelektrolyty. Kinetika v biologických systémech. Polarografie a voltametrie biopolymerů a jejich složek. Procesy přenosu elektronů a iontů v biologických systémech.

'Výukové metody'

**Metody hodnocení:** typové příklady probírány v průběhu přednášek závěrečná zkouška nebo koloqium - ústní forma

#### **Literatura:**

- Kalous, Vítěz - Pavlíček, Zdeněk. *Biofyzikální chemie*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství technické literatury, 1980. 349 s. info
- *Biochemie*. Edited by Daniel Voet - Judith G. Voet, Translated by A. Maelicke - W. Müller-E. Weinheim : VCH Verlagsgesellschaft, 1992. 1237 s. ISBN 3-527-28242-4. info
- *Biofyzikální chemie*. Edited by Milan Kodíček - Vladimír Karpenko. 2. přeprac. a rozš. vyd. Praha : Academia, 2000. 337 s. ISBN 80-200-0791-1. info
- Cantor, Charles R. - Schimmel, Paul R. *Biophysical chemistry. Part II, Techniques for the study of biological structure and function*. 12th print. New York : W.H. Freeman and Company, 2001. xxix, s. 3. ISBN 0-7167-1189-3. info
- Cantor, Charles R. - Schimmel, Paul R. *Biophysical chemistry. Part I, The conformation of biological macromolecules*. 11th print. New York : W.H. Freeman and Company, 1999. xxii, 341. ISBN 0-7167-1042-0. info
- Cantor, Charles R. - Schimmel, Paul R. *Biophysical chemistry. Part III, The behavior of biological macromolecules*. New York : W.H. Freeman and Company, 1980. xxix, s. 8. ISBN 0-7167-1191-5. info
- H. Eisenberg: *Biological Macromolecules and Polyelectrolytes in Solutions*, Clarendon Press, Oxford 1976
- Morawetz, Herbert. *Chování makromolekul v roztoku : Macromolecules in solution (Orig.)*. Vyd. 1. Praha : Academia, nakladatelství Československé akademie věd, 1971. 512 s. info

#### **C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie**

**Vyučující:** [doc. RNDr. Pavel Brož Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět technikám NMR jako je pulsní NMR a vysvětlit získané údaje. Bude umět použít informace o chemických posunech, interakčních konstantách, tvarech a intenzitách NMR signálů k charakterizaci studovaných soustav a v oblasti kinetických studií. Na základě nabytých znalostí bude schopen interpretovat NMR signály a odvodit neznámé struktury.

#### **Osnova:**

1. Correlation of chemical shifts Components of screening constant, dependence of delta on electronegativity, on sigma's. Diamagnetic anisotropy, solvent shift, "edge-to face" and "face-to-face" interaction. Calculation of NMR spectra from increments and from electron densities. 2.Lanthanide shift reagents <sup>1</sup>H NMR spectrum in the presence of a shift reagent. Bound chemical shift and shifting magnitude. Nonlinearity of induced chemical shifts with high concentration of LSR. Map of dipolar field (McConnell-Robertson equation). Increase of anisotropy by addition of LSR. Optical active shift reagents - diastereomeric complexes. Topomerisation and the rotation isomerie. Crystal structure of dipirydil-LSR. 1:1 and 1:2 complexes - equilibrium constants. Complexation of LSR and salts of Ag, mixed shift reagent. LSR and quaternal salts. 3.Coupling constants Energetic levels for AX systém ( J=0, J>0 and J

**Výukové metody:** Teoretická příprava v oblasti NMR metod pro identifikaci chemické struktury a kinetická studia. Přednáška je doplněna praktickými příklady.

**Metody hodnocení:** Ústní zkouška buď v angličtině nebo češtině.

**Literatura:**

- Holík, Miroslav. *Čtyři lekce z NMR spektroskopie*. 1. vyd. Brno : Universita J.E. Purkyně, 1987. 113 s. info
- Schraml, Jan. *Dvourozměrná NMR spektroskopie*. 1. vyd. Praha : Academia, 1987. 130 s. info
- Hájek, Milan. *Kvantitativní FT NMR spektroskopie v chemické praxi*. 1. vyd. Praha : Academia, 1989. 164 s. ISBN 80-200-0096-8. info
- Goljer, Igor - Liptaj, Tibor. *Nové metody FT NMR spektroskopie kvapalín*. 1. vyd. Bratislava : VEDA vydavateľstvo Slovenskej akadémie vied, 1986. 181 s. info

**C6200 Biochemické metody**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Zdeněk Glatz CSc.](#), [doc. RNDr. Petr Zbořil CSc.](#)

**Rozsah:** 4/0/0. 4 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Hlavní cíle kurzu jsou: porozumění základům metod desintegrace tkání, metody izolace, purifikace enzymů a biopolymerů, Chromatografické metody, elektromigrační metody. Stanovení čistoty, vlastností enzymů a biopolymerů. Spektroskopické, elektrochemické a fyzikální metody biochemické analýzy.

**Osnova:**

1. Úvod. Zásady práce s biologickým materiálem. Strategie a plánování. 2. Desintegrace tkání a buněk. Centrifugace a sedimentační analýza. 3. Fázové separace. Srážení a extrakce. Membránové separace. Zahřívání a sušení. Úprava vody. 4. Chromatografické metody. Obecné principy a charakteristiky. Chromatografie adsorpční a rozdělovací. Iontoměničová chromatografie, chromatofokusace. 5. Chromatografie reverzně fázová a iontově párová. Hydrofobní chromatografie Chromatografie gelová. Chromatografie afinitní. Plynová chromatografie. 6. Elektromigrační metody. Obecné charakteristiky a vlivy. Elektroforesa volná a zónová. 7. Izoelektrická fokusace. Isotachoforesa. Blotting 8. Metody určování velikosti a tvaru makromolekul. Hmotnostní spektroskopie. Koligativní metody, osmometrie. 9. Viskosimetrie. Translační a rotační difuze. Rozptyl světla a Roentgenova záření rentgenostrukturní analýza. Elektrochemické metody v biochemii. Princip, rozdělení. Potenciometrie, ISE. Bioselektivní elektrody. 10. Amperometrické metody. Polarografie a voltametrie, biosensory. Kalorimetrie, typy kalorimetrů, biochemické aplikace. Speciální aplikace biochemických metod rychlé reakce, iontová výměna. Analýza vazby ligandů na makromolekuly, metody stanovení vazebných parametrů. 11. Elektronová spektra molekul, přechody, základní a excitovaný stav, vliv prostředí, UV-VIS spektrofotometrie, použití ke stanovení látek, použití ke studiu struktury bílkovin 12. Luminiscenční metody, kvantový výtěžek, vliv prostředí, Spektrofluorimetrie, princip, užití ke stanovení látek, použití ke studiu konformace bílkovin, zhášení fluorescence transfer energie, polarizovaná, fluorescence, fosforimetrie 13. IR spektroskopie a její užití ke studiu struktury bílkovin, Ramanův rozptyl a jeho použití ke studiu struktury bílkovin. Chiroptické metody a jejich princip, ORD a CD a jejich použití ke studiu konformace bílkovin 14. NMR, EPR spektra a jejich použití ke studiu struktury bílkovin, Mossbauerova spektroskopie a její použití v biochemii,

**Výukové metody:** Přednášky doplněné demonstracemi dané problematiky za použití videí a demonstračních programů, které jsou studentům k dispozici na webových stránkách daného předmětu.

**Metody hodnocení:** Základní přednáška, na které se podílí více vyučujících, včetně externistů, zkouška je ústní formou. Zkoušející prof. Glatz

**Literatura:**

- Kalous, Vítěz. *Metody chemického výzkumu*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1987. 430 s. info
- Anzenbacher, Pavel - Kovář, Jan. *Metody chemického výzkumu pro biochemiky*. 1. vyd. Praha : Ministerstvo školství ČSR, 1986. 199 s. info
- Kalous, Vítěz - Pavlíček, Zdeněk. *Biofyzikální chemie*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství technické literatury, 1980. 349 s. info

**C6210 Biotechnologie**

**Vyučující:** [doc. Ing. Martin Mandl CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Cílem přednášky jsou biochemické a chemické principy vybraných klasických a moderních biotechnologií a základy procesů uplatňujících se ve fermentorech a dalších zařízeních sloužících k biotechnologickému využití metabolické aktivity organismů nebo enzymů. Obsah kurzu je věnován biochemii a fyziologii organismů ve vztahu k jejich využití v biotechnologii (od kvasných produktů k ochraně životního prostředí). Větší část předmětu je věnována kinetice bioproduktu v jednorázovém a kontinuálním systému, modelům růstu biomasy, spotřeby substrátů a tvorby produktů, interpretaci kinetických modelů v biotechnologii a mikrobiální (buněčné) fyziologii a problematice imobilizovaných buněk a enzymů.

**Osnova:**

- Mikrobiální a enzymová biotechnologie, historický přehled. Biochemie, mikrobiologie a inženýrské přístupy. Biologický materiál v biotechnologii.
- Biochemické a chemické principy tradičních a moderních biotechnologií. Vybrané kvasné procesy, bioplyn, produkce mikrobiální biomasy jako zdroje proteinů, biohydrometalurgie, biotransformace.
- Biotechnologie v ochraně životního prostředí. Bioremediace (toxické kovy, uhlovodíky).
- Z laboratoře do praxe. Kultivační a produkční zařízení, laboratorní a provozní měřítka. Míchání ve fermentoru, dopad na metabolickou aktivitu organismů.
- Sterilizace, chemické a fyzikální postupy, kritéria účinnosti sterilizace.
- Aerace v bioprocesech. Teorie přestupu kyslíku.
- Metody určení objemového koeficientu přestupu kyslíku. Parametry aerace ve fermentoru ve vztahu k spotřebě kyslíku produkčními kulturami a enzymy.
- Jednorázová kultivace. Kinetika růstu a produkce. Modely spotřeby substrátů a tvorby produktů.
- Kinetika odumírání a autolýzy buněk. Kinetické modely v biotechnologii a mikrobiální (buněčné) fyziologii, výběr modelu.
- Kontinuální kultivace. Určení kinetických a fyziologických parametrů kultury v chemostatu, vztah k jednorázové kultivaci.
- Imobilizované buňky a enzymy, principy a aplikace.
- Bioreaktory s imobilizovanými buňkami a enzymy, kinetické přístupy.

**Výukové metody:** Přednášky z vybraných kapitol biotechnologie. Diskuse k detailním problematikám.

**Metody hodnocení:** Přednášky, diskuse v hodině. Ústní zkouška. Důraz je kladen na pochopení principů.

**Literatura:**

- Kaštánek, František. *Bioinženýrství*. Vyd. 1. Praha : Academia, 2001. 334 s. ISBN 80-200-0768-7. info
- Stanbury, Peter F. - Whitaker, Allan - Hall, Stephen J. *Principles of fermentation technology*. 2nd ed. Oxford : Pergamon, 1995. xviii, 357. ISBN 0-08-036131-5. info
- Doran, Pauline M. *Bioprocess engineering principles*. London : Academic Press, 1995. xiv, 439 s. ISBN 0-12-220856-0. info
- Krumphanzl, Vladimír - Řeháček, Zdeněk. *Mikrobiální technologie : buňka a techniky jejího využití*. 1. vyd. Praha : Academia, 1988. 360 s., 24. info
- Alexander, Martin. *Biodegradation and bioremediation*. San Diego : Academic Press, 1994. 302 s. ISBN 0-12-049860-. info

**C6260 Metody separace proteinů**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Zdeněk Glatz CSc.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (příř plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Cílem této přednášky je, aby studenti získali základní znalosti o separačních metodách využívaných v biochemii a molekulární biologii pro purifikaci bílkovin. První část je věnována úvodním metodám práce se vzorky biologického materiálu jako jsou extrakce, centrifugace, srážení, ultrafiltrace a lyofilizace. Další část je věnována chromatografickým metodám. V poslední části jsou podány informace o elektromigračních metodách.

**Osnova:**

1. Úvod. Zásady práce s biologickým materiálem. Strategie a plánování .
2. Desintegrace tkání a buněk. Centrifugace a sedimentační analýza.
3. Fázové separace. Srážení a extrakce. Membránové separace.
4. Zahušťování a sušení. Úprava vody.
5. Chromatografické metody. Obecné principy a charakteristiky.
6. Chromatografie adsorpční a rozdělovací.
7. Ionto- a iontoměničová chromatografie, chromatofokuse.
8. Chromatografie reverzně fázová a iontově párová. Hydrofobní chromatografie
9. Chromatografie gelová.



10.Chromatografie afinitní. 11.Elektromigrační metody. Obecné charakteristiky a vlivy. 12.Elektroforesa volná a zónová 13.Izoelektrická fokusace. 14.Isotachoforesa.

**Výukové metody:** Přednášky doplněné demonstracemi dané problematiky za použití videí a demonstračních programů, které jsou studentům k dispozici na webových stránkách daného předmětu.

**Metody hodnocení:** Zkouška probíhá písemnou formou, studenti přitom dostávají test, který zahrnuje otázky z metod extrakce a přípravy vzorků, centrifugačních, chromatografických a elektronmigračních metod. Doba testu je 1 hodina. Klasifikace je A-F respektive "uspěl nebo "neuspěl".

**Literatura:**

- Anzenbacher, Pavel - Kovář, Jan. *Metody chemického výzkumu pro biochemiky*. 1. vyd. Praha : Ministerstvo školství ČSR, 1986. 199 s. info
- *Guide to protein purification*. Edited by Murray P. Deutscher. San Diego : Academic Press, 1990. xiii, 894. ISBN 0-12-213585-7. info
- *Protein purification methods :a practical approach*. Edited by E. L. V. Harris - S. Angal. Oxford : Oxford University Press, 1989. xvi, 317 s. ISBN 0-19-963003-8. info
- *A practical guide to membrane protein purification*. Edited by Gebhard von Jagow - Hermann Schagger. San Diego : Academic Press, 1994. 166 s. ISBN 0-12-725550-8. info

### C6310 Symetrie molekul

**Vyučující:** [doc. RNDr. Pavel Kubáček CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Základní vlastnosti grupy, multiplikační tabulka a třída. Prvky a operace symetrie. Grupy bodové symetrie, klasifikace molekul. Reprezentace grupy, charaktery. Výběrová pravidla ve spektroskopii a alikace v teorii chemické vazby. Cílem předmětu je seznámit s východisky rozboru chemického problému z pohledu symetrie a tento rozbor procvičit.

**Osnova:**

Úvod. Symetrie a přírodní vědy, historický přehled. 1. Grupa, vlastnosti grupy, multiplikační tabulka, podgrupa, třída. 2. Prvky a operace symetrie. 3. Bodové grupy symetrie, klasifikace molekul podle symetrie. 4. Vlastnosti molekul podmíněné symetrií. 5. Maticové reprezentace operací symetrie, charaktery. 6. Neredukovatelné reprezentace, jejich charaktery, degenerace. 7. Tabulky charakterů neredukovatelných reprezentací. 8. Transformační vlastnosti funkcí  $x, y, z, xy, xz, yz, x^2, y^2, z^2$  a rotací. 9. Nulové a nenulové hodnoty integrálů. 10. Výběrová pravidla pro spektrální přechody. 11. Symetrie molekulových vibrací. 12. Symetrie a chemická vazba.

**Výukové metody:** Přednáška doplněná podle potřeby **procvičováním** probírané látky.

**Metody hodnocení:** Zkouška / kolokvium probíhá formou písemného testu. Při zpracování testu studenti mohou použít učebnice, poznámky a další vlastní pomůcky. Požadavky na úspěšnost testu se liší podle zakončení.

**Literatura:**

- Atkins, P. W. - Paula, Julio de. *Atkins' physical chemistry*. 8th ed. Oxford : Oxford University Press, 2006. xxx, 1064. ISBN 0-19-870072-5. info
- Cotton, Frank Albert. *Chemical Applications of Group Theory*, 3rd Edition, John Wiley & Sons; ISBN: 0471510947
- Hargittai, István - Hargittai, Magdolna. *Symmetry through the eyes of a chemist*. 2nd ed. New York : Plenum Press, 1995. xii, 496 s. ISBN 0-306-44852-1. info

### C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules

**Vyučující:** [doc. Mgr. Lukáš Židek Ph.D.](#), [doc. RNDr. Radovan Fiala CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** The course will provide introduction to modern NMR techniques which can be applied to extract structural information for small and mid-size biological macromolecules - peptides, proteins, DNA and RNA oligonucleotides. Experimental procedures and computational protocols for determination of three-dimensional structures and dynamics based on NMR data will be discussed. Students who finish the course successfully will understand principles of NMR and its applications to biochemical problems described in original research articles, to analyze NMR experiments and design their modification, to chose the correct

approach of solving a given problem, and to combine results of individual approaches to obtain a complex picture of the studied problem. The course is designed so that students who continue to study in a PhD program will be able to apply the learned skills in their own research projects.

**Osnova:**

1. NMR as a tool for structure biology 2. Basic NMR Experiments 3. Key to biomolecular NMR: Idea of correlation 4. First step in NMR of proteins 5. Second step in determination of protein structure 6. From spectra to structure 7. Special features of nucleic acid NMR 8. Nucleic acid structure by NMR 9. Molecules are not rigid 10. From relaxation to molecular motions 11. Molecules are not alone 12. Beyond small soluble biomolecules

**Výukové metody:** Lectures combining explanation of basic ideas with analysis of model examples, computer simulations of the discussed topics.

**Metody hodnocení:** Oral examination in a form of discussion of problems solved by the student.

**Literatura:**

- *Protein NMR spectroscopy :principles and practice*. Edited by John Cavanagh. 2nd ed. Amsterdam : Elsevier, 2007. xxv, 885 s. ISBN 978-0-12-164491. info

**C6800 Multinukleární NMR spektroskopie**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jiří Pinkas Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** V přednášce jsou diskutovány základní měřitelné veličiny NMR spekter, jako stínící konstanty a chemické posuny, skalární interakční konstanty a relaxační časy. Dále jsou zdůrazněny vlivy chemických a fyzikálních faktorů, strukturních parametrů a vliv chemické výměny na hodnoty těchto veličin. Praktické příklady a problémy jsou uvedeny z oblasti multinukleární NMR spektroskopie anorganických látek. Studenti se v tomto kurzu naučí: Určit prvky symetrie v molekule a předpovědět počet očekávaných signálů ve spektrech přítomných NMR aktivních jader. Odhadnout přibližnou hodnotu chemického posunu ve spektru sledovaného jádra v závislosti na struktuře molekuly a elektronickém okolí jádra. Určit očekávanou multiplicitu signálu sledovaného jádra v závislosti na interakci s okolními jádry. Odhadovat přibližnou velikost interakčních konstant v závislosti na vazebných a strukturních poměrech v molekule. Posoudit jaderné, elektronické a strukturní vlivy na relaxační rychlosti jader. Posoudit vliv chemických a fyzikálních faktorů a strukturních parametrů na možnost chemické výměny a ovlivnění počtu a tvaru signálů ve spektrech.

**Osnova:**

1. Historický úvod. Základní pojmy: jaderný spin, magnetický moment, magnetogyrický poměr, isotopické zastoupení, magnetizace, populace, Larmorova frekvence. 2. Stínící konstanta, diamagnetické a paramagnetické stínění, Ramseyův vzorec. Lokální a nelokální vlivy. Chemický posun, referenční standardy. Rozsah chemických posunů. 3. Parametry ovlivňující stínící konstantu: oxidační číslo, koordinační číslo, náboj, symetrie, HOMO-LUMO rozštěpení, elektronegativita, normální a inverzní halogenová závislost, nefelauxetická a spektrochemická řada. 4. Korelace chemických posunů s vazebnými délkami, úhly, UV maximy, IR silovými konstantami, Hammetovými sigma konstantami. 5. Vlivy na chemický posun: isotopové efekty, SIIS, magnetická anisotropie chemických skupin, teplota, rozpouštědlo, ASIS. 6. Satelitní signály, isotopomery, výpočet isotopického zastoupení. 7. Chemická ekvivalence a symetrie molekul. Prochirální a C2 skupiny. Homotopická, enantiotopická, diastereotopická a heterotopická jádra. Chirální rozpouštědla, posuvová činidla. 8. Dipolární interakce. NMR spektroskopie v pevné fázi. 9. Skalární interakce. Interakční konstanta, Diracův model, Pople-Santryho vzorec, redukovaná interakční konstanta. Vlivy na interakční konstantu: s-charakter, hybridizace, elektronegativita, koordinační číslo, vazebné úhly, dihedrální úhly, Karplusova rovnice. 10. Konstrukce multiplétů. Notace spinových systémů. Jednoduché spinové systémy: AB, ABX, AA'X, AA'XX'. Simulace spekter. 11. Relaxace. Relaxační časy T1 a T2. Korelační čas. Extreme narrowing limit. Inversion Recovery a Spin Echo metody. 12. Relaxační mechanismy: dipolární, anisotropie chemického posunu, spinová rotace, skalární relaxace, kvadrupolová, paramagnetická. NOE. 13. Dynamická NMR spektroskopie. Chemická výměna. Ekvivalentní a neekvivalentní systémy. Simulace dynamických NMR spekter.

**Výukové metody:** Přednáška sestává ze 14 lekcí po 50 minutách. Materiály k přednášce, jako jsou prezentace, doporučené články z literatury, tabulky, jsou vloženy do ISu. V relevantních případech se stávají součástí kurzu i přednášky hostujících profesorů v programu INNOLEC.

**Metody hodnocení:** Během semestru jsou zadány 3 hodnocené domácí úkoly. Na konci semestru každý student přednese krátkou prezentaci na vybrané téma z NMR spektroskopie. Písemná závěrečná zkouška hodnocena max. 100 body, minimum dosažených bodů je 50. Váhy hodnocení: závěrečná zkouška 75%, domácí úlohy 15%, prezentace 10%.

**Literatura:**

- *NMR and the periodic table.* Edited by Robin Kingsley Harris - Brian E. Mann. London : Academic Press, 1978. 459 s. ISBN 0-12-327650-0. info
- Goljer, Igor - Liptaj, Tibor. *Nové metody FT NMR spektroskopie kvapalín.* 1. vyd. Bratislava : VEDA vydavateľstvo Slovenskej akadémie vied, 1986. 181 s. info
- Wehrli, F. W. - Wirthlin, T. *Interpretation of carbon-13 NMR spectra.* London : Heyden, 1980. 310 s. ISBN 0-85501-207-2. info
- *Two-dimensional NMR spectroscopy : applications for chemists and biochemists.* Edited by William R. Croasmun - Robert M. K. Carlson. 2nd ed. New York : VCH Publishers, 1994. xxii, 958. ISBN 1-56081-664-3. info
- Braun, Siegmur - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *150 and more basic NMR experiments : a practical course.* 2nd exp. ed. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 595 s. ISBN 3-527-29512-7. info
- Breitmaier, Eberhard. *Structure elucidation by NMR in organic chemistry : a practical guide.* Translated by Julia Wade. Chichester : John Wiley & Sons, 1993. 265 s. ISBN 0-471-93381-3. info
- Schraml, Jan. *Dvourozměrná NMR spektroskopie.* 1. vyd. Praha : Academia, 1987. 130 s. info
- Sanders, Jeremy K. M. *Modern NMR spectroscopy : a workbook of chemical problems.* 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 1993. 127 s. ISBN 0-19-855812-0. info
- Farrar, Thomas C. - Becker, Edwin D. *Pulse and Fourier Transform NMR : Introduction to Theory and Methods.* New York : Academic Press, 1971. 115 s. info
- Friebolin, Horst. *Basic one- and two-dimensional NMR spectroscopy.* 3. vyd. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 385 s. ISBN 3527295135. info
- Hájek, Milan. *Kvantitativní FT NMR spektroskopie v chemické praxi.* 1. vyd. Praha : Academia, 1989. 164 s. ISBN 80-200-0096-8. info
- Macomber, Roger. *A complete introduction to modern NMR spectroscopy.* New York, USA : John Wiley and Sons, 1998. 382 s. ISBN 0471157368. info
- Derome, Andrew E. *Modern NMR techniques for chemistry research.* Oxford : Pergamon, 1987. xvii, 280. ISBN 0-08-032513-0. info

**C6950 Chemická exkurze**

**Vyučující:** [RNDr. Slávka Janků Ph.D.](#)

**Rozsah:** 0/0/0. 1 týden. 0 kr. Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Exkurze do podniků s chemickou výrobou v České republice.

**Osnova:**

Návštěva celkem 10 podniků se zaměřením na organickou, anorganickou a biochemickou výrobu.

'Výukové metody'"Metody hodnocení'"Literatura'

**C6960 Odborná praxe**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#)

**Rozsah:** 0/0/0. 3 týdny. 0 kr. Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Hlavním cílem odborné praxe je seznámení se s provozem chemického pracoviště výzkumného charakteru mimo Masarykovu univerzitu nebo výrobního provozu/laboratoře.

**Osnova:**

Konkrétní náplň odborné praxe je stanovena ve spolupráci s vybraným externím pracovištěm.

**Výukové metody:** Odborná praxe v zařízeních mimo Masarykovu univerzitu.

**Metody hodnocení:** Zápočet

'Literatura'

**C7777 Zacházení s chemickými látkami**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jiří Příhoda CSc.](#)

**Rozsah:** 0/0/0. 2 hodiny školení autorizovanou osobou. 0 kr. Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Kurs C7777 Zacházení s chemickými látkami je povinný pro všechny studenty, kteří s nimi během studia na PĚF MU pracují. Tato skutečnost je dána studijními plány, za což odpovídají garanti jednotlivých studijních oborů. Cílem je seznámit studenty s platnou chemickou legislativou, pravidly pro zacházení s chemickými látkami a likvidací chemických odpadů.

**Osnova:**

- Informace o působnosti: zákona 356/2003 Sb. a zákona 352/1999 Sb., nařízení vlády č. 25/1999 a 258/2001, vyhlášky 27/1999 Sb., a zákona 258/2000 Sb. o ochraně veřejného zdraví, které se týkají bezpečnosti při zacházení s chemickými látkami. Probíraná témata: základní pojmy charakteristika nebezpečných látek výstražné symboly, R-věty, S-věty bezpečnostní list balení a označování nebezpečných látek skladování nebezpečných látek zabezpečení nebezpečných látek odpovědnost pracovníků všeobecné zásady práce v chemické laboratoři likvidace odpadů vzniklých při práci s nebezpečnými látkami likvidace zbytků nebezpečných chemických látek ukládání chemických látek chemické databáze a odkazy na informační zdroje

**Výukové metody:** Úvodní přednáška a samostatná teoretická příprava dle materiálů na webu

**Metody hodnocení:** Dvouhodinová přednáška na počátku podzimního semestru. Povinná pro studenty 1. ročníku studia, pro ostatní ročníky a doktorandy je fakultativní. Zápočet se získá na základě každoročního absolvování testu (platí pro všechny zapsané studenty).

**Literatura:**

- Adámková, Marie. *Praktická příručka pro nakládání s chemickými látkami a přípravky včetně nebezpečných*. Praha : Dashöfer, 1999. 1 sv. (rů. ISBN 80-86229-08-4. info
- <http://www.rect.muni.cz/nso/>

### **C7790 Počítačová chemie a molekulové modelování I**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Kurs je zaměřen na získání základních znalostí v oblasti výpočetní chemie. Jeho orientace je výrazně aplikační. Student získá přehled o reprezentaci molekul v počítači a o tom, jaké údaje zadat počítačovým programům, aby výsledky modelování byly realistické. V závěru se studenti seznámí s některým uživatelsky příjemným programovým balíkem pro počítačové modelování molekul a molekulárních systémů.

**Osnova:**

1. Experiment versus molekulové modelování (úvod do molekulového modelování, validace a predikce, přehled experimentálních metod s jednomolekulárním rozlišením)
2. Kvantová mechanika (stručný úvod, Bornova-Oppenheimerova aproximace, koncept hyperploch potenciální energie, stručný přehled metod a programů)
3. Hyperplochy potenciální energie (význam, optimalizační metody, hledání lokálních a globálních minim a tranzitních stavů, výpočet termodynamických veličin)
4. Molekulová mechanika (silová pole, dalekodosahové interakce, modelování rozpouštědel, periodické okrajové podmínky, přehled silových polí)
5. Molekulová dynamika (vývoj systému v čase, pohybové rovnice, kontrola teploty a tlaku, vlastnosti systému, stručný přehled programů pro molekulovou dynamiku)
6. Speciální metody (Monte Carlo simulace, hrubozrné modely)

**Výukové metody:** přednáška, diskuze

**Metody hodnocení:** Kurz je zakončen písemným testem, který je následován ústní zkouškou.

**Literatura:**

- Remko, M. *Molekulové modelovanie. Princípy a aplikácie*. Bratislava : Slovak Academic Press, 2000. info
- Jensen, Frank. *Introduction to Computational Chemistry*. New York : J. Wiley & Sons Ltd., 1999. info
- Lipkowitz, K B - Boyd, D B. *Reviews in Computational Chemistry 1-9*. New York : VCH Publishers, 1998. info
- Hehre, Warren J. - Shusterman, Alan J. - Huang, W. Wayne. *A laboratory book of computational organic chemistry*. Irvine, Calif. : Wavefunction, 1996. xiv, 291 s. ISBN 0-9643495-5-8. info

- Foresman, J B - Frisch, A. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Pittsburgh : Gaussian, Inc., 1996. info

### C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#)

**Rozsah:** 0/1/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Ve cvičení se studenti seznámí s některými uživatelsky příjemnými programovými balíky pro počítačové modelování molekul a molekulárních systémů.

**Osnova:**

1. Seznámení s programem Spartan - <http://www.wavefun.com/> (stavba molekul, typy výpočtů, analýza výsledků)
2. Seznámení s programem Gaussian - <http://www.gaussian.com/> (příprava vstupních dat, analýza výsledků a jejich vizualizace - Molden, Molekel, VMD)
3. Seznámení s programovým balíkem Amber - <http://ambermd.org/> (příprava studovaného systému, ekvilibrace, dynamika, analýza výsledků a jejich vizualizace - VMD)
4. Vypracování samostatného projektu

**Výukové metody:** praktické cvičení

**Metody hodnocení:** Zápočet je udělen za dokončení projektu a jeho obhájení. Účast je povinná (povolené jsou dvě dopředu omluvené absence).

**Literatura:**

- Lipkowitz, K B - Boyd, D B. *Reviews in Computational Chemistry 1-9*. New York : VCH Publishers, 1998. info
- Remko, Milan. *Molekulové modelovanie : princípy a aplikácie*. Bratislava : Slovak Academic Press, 2000. 239 s. ISBN 80-88908-62-0. info
- *Introduction to computational chemistry*. Edited by Frank Jensen. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 2007. xx, 599 s. ISBN 0470011874. info

### C7830 Kapilární elektroforéza

**Vyučující:** [prof. RNDr. Josef Havel DrSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Separační metody hrají významnou roli nejen v analytické chemii ale i ve všech ostatních oblastech chemie, v chemické či biochemické technologii a ve farmacii. Kapilární elektroforéza je moderní separační metodou a jednou z neúčinnějších separačních technik vůbec. Její nespornou výhodou kromě vysoké účinnosti je malá spotřeba vzorku a možnost separace i velmi podobných látek a i různých typů izomerů včetně látek chirálních. Hlavním cílem kurzu je studentům vysvětlit základy této elektromigrační techniky tak, aby byli schopni na základě nabytých znalostí tuto techniku racionálně používat v praxi a hlavně ji umět aplikovat i na v literatuře dosud nepopsané případy separací a stanovení látek anorganických, organických, farmak a léčiv a také ji používat v jiných oborech - biologických, medicínských a technologických. Součástí kurzu jsou proto také praktická cvičení a řešení problémů na počítači a simulačních programech vybavených databází látek, jejich konstant, atd. což dovoluje studenty učit myslet. Kurs je také doplněn základními postupy vývoje elektroforetických metod a jejich optimalisace včetně použití kombinace plánování pokusů a aplikace umělých neuronových sítí.

**Osnova:**

Historie vývoje, podstata elektromigrace Zařazení kapilární elektroforézy do separačních metod Základní módy elektroforézy Základní pojmy: iontová pohyblivost, efektivní pohyblivost Výpočty iontové a efekt. pohyblivosti, jejich stanovení Elektroosmotický tok, podstata. Sternova vrstva, Zeta potenciál Možnosti měření elektroosmotického toku Modifikace EOF různými technikami Základy instrumentace, schema přístroje, rozměry kapilár, detekční okénko Technické detaily, pokryté a nepokryté kapiláry DETEKTORY a detekční technika v CE Uv Vis, DAD, potenciometrie, vodivost, MS a LIF Spojení CE a MS ev, CE a MALDI Metody dávkování vzorků v CE. Hydrodynamické a elektrokinetické, rozdily. Základní elektrolyt v CE, změny pH, druhy elektrolytů Disperse v CE, základní faktory Ohmův zákon, vliv teploty, eliminace Elektrokinetická micelární chromatografie, principy a separace neutrálních látek Chemické rovnováhy a kinetika v CE Vliv chemických reakcí na separaci, komplexace a její využití Chirální separace, chirální selektory, možnosti ovlivnění APLIKACE CE v různých oblastech, stručný přehled OPTIMALISACE v CE



a základní možnosti jejího provedení Jednofaktorové pokusy, multivariační přístupy a umělé neuronové sítě. Možnosti dalšího vývoje, chipová elektroforéza.

**Výukové metody:** Přednášky a demonstrace separačních procesů a cvičení na počítači.

**Metody hodnocení:** Písemná zkouška doplněná ústním pohovorem

**Literatura:**

- Jandik, Petr - Bonn, Günther. *Capillary electrophoresis of small molecules and ions*. New York : VCH Publishers, 1993. 298 s. ISBN 1-56081-533-7. info
- Kuhn, Reinhard - Hoffstetter-Kuhn, Sabrina. *Capillary electrophoresis : principles and practice*. Berlin : Springer-Verlag, 1993. x, 375 s. ISBN 3-540-56434-9-. info
- Chankvetadze, Bezhana. *Capillary electrophoresis in chiral analysis*. Chichester : John Wiley & Sons, 1997. xiii, 555. ISBN 0-471-97415-3. info
- *Affinity capillary electrophoresis in pharmaceuticals and biopharmaceuticals*. Edited by Reinhard H. H. Neubert - Hans-Hermann Rüttinger. New York : Marcel Dekker, 2003. xi, 362 s. ISBN 0-8247-0951-9. info
- Kuhn, Reinhard - Hoffstetter-Kuhn, Sabrina. *Capillary electrophoresis : principles and practice*. Berlin : Springer-Verlag, 1993. x, 375 s. ISBN 0-387-56434-9. info
- Schwartz, Herb. *Separation of proteins and peptides by Capillary Electrophoresis: Application to Analytical Biotechnology*. : Beckman Coulter, 1993. 119 s. info
- *Capillary electrophoresis in analytical biotechnology*. Edited by Pier Giorgio Righetti. Boca Raton : CRC Press, 1996. 551 s. ISBN 0-8493-7825-7. info
- Li, Sam F. Y. *Capillary electrophoresis : principles, practice and applications*. Amsterdam : Elsevier, 1993. 582 s. ISBN 0-444-81590-2. info
- *Capillary electrophoresis of proteins and peptides*. Edited by Mark A. Strega - Avinash L. Lagu. Totowa, N.J. : Humana Press, 2004. xi, 332 s. ISBN 1-58829-017-4. info
- *Capillary electrophoresis of nucleic acids*. Edited by Keith R. Mitchelson - Jing Cheng. Totowa, N.J. : Humana Press, 2001. xx, 408 s. ISBN 0-89603-765-7. info

## C7860 Rostlinná biochemie

**Vyučující:** [Mgr. Tomáš Kašparovský Ph.D.](#), [Mgr. Jan Lochman Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Pokročilá přednáška. Základní složky rostlinné buňky. Asimilační a disimilační metabolismus rostlinné buňky. Asimilace dusíku, nitrátu, uhlíku, síry. Metabolismus tuků, respirace, fotorespirace. Fytohormony. Rostlinná bioenergetika. Obranné reakce rostlin (allelopathie, sekundární metabolity, fytoalexiny, elicitory). Pasivní a aktivní ochrana. Interakce rostlina-pathogen. Použití a mechanismus účinku herbicidů. Rostliny jako zdroj biomasy.

**Osnova:**

1) Cytoplasmatická membrána a membránový transport. Plazmalema a tonoplast. Role ATPáz při transportu přes pl. membránu a tonoplast. 2) Signalizace a regulace 3) Metabolismus dusíku u rostlin. Fixace dusíku, asimilace amoniaku, role glutamátdehydrogenasy. Glutaminsynthetasa, asimilační nitrát a nitrit reduktasa, nitrifikace. 4) Metabolismus síry 5) Metabolismus sacharidů, lipidů. Respirační řetězec rostlinných mitochondrií. Vztah mezi glyoxylátovým a Krebsovým cyklem Odbourávání tuků (alfa-oxidace MK), odbourávání zásobních bílkovin 6) Struktura buněčné stěny rostlin. (složení, struktura, biosyn- thesa; mikrofibrilární polysacharidy, amorfni polysacharidy, lignin, lignifikace, Odbourávání polysacharidů (amylasy, R-enzym, D-enzym, fosforylasa), odbourávání polysacharidů u hub, odbourávání celulózy, odbourávání ligninu 7) Fotosyntéza (světelná fáze). Fotosynt. pigmenty, chlorofyl, fykobiliny karotenoidy, fotochemie. Fotorespirace 8) Fotosyntéza temná fáze. Inhibitory, synthesesa polysacharidů oligosacharidů a glykosidů. Asimilace CO<sub>2</sub>(rostliny typu C<sub>4</sub> a C<sub>6</sub>) 9) Interakce rostlin s patogeny. Allelopathie: fytoncidy, fytoalexiny, alkaloidy, přírodní insekticidy, fytoalexiny, regulace jejich syntézy, mechanismus účinku. 10) Rostlinné hormony jejich struktura, synthesesa, mechanismus účinku na molekulární úrovni (auxiny, gibbereliny, cytokininy kys. abscisová, ethylen) 11) Izolaci komponent rostlinné buňky. Farmakologické využití sekundárních metabolitů: rostliny a léčba malárie, rakoviny, AIDS, přírodní insekticidy

**Výukové metody:** Teoretická příprava

**Metody hodnocení:** Pokročilá přednáška, písemná zkouška

**Literatura:**

- Buchanan, Bob - Gruissem, Wilhelm - Jones, Russell. *Biochemistry & molecular biology of plants*. Rockville, Maryland : American society of plant physiologists, 2000. 1367 s. ISBN 0-943088-39-9. info
- Heldt- Plant Biochemistry and Molecular Biology (Acad Press, Elsevier), 3rd Edition, 2005

### C7870 Biometrika

**Vyučující:** [doc. Ing. Martin Mandl CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Cílem přednášky je aplikace vybraných statistických metod pro vyhodnocování údajů získaných z (bio)chemických a biologických procesů. Obsah kurzu je zaměřen na hodnocení experimentálních výsledků a metod, vyjadřování chyb, testování významnosti kvantitativních a kvalitativních údajů a regresní a korelační analýzu s důrazem na využití v (bio)chemii, mikrobiologii a biotechnologii.

**Osnova:**

- Úvod do aplikace vybraných statistických metod na řešení a vyhodnocování experimentálních výsledků v (bio)chemii, biotechnologii a mikrobiologii.
- Statistické charakteristiky souboru a výběru, typy rozdělení.
- Intervaly spolehlivosti, testování hypotéz o statistické významnosti výsledků.
- Vylučování odlehlých výsledků. Testování výsledků pro Poissonovo rozdělení (aplikace na mikrobiologické metody).
- Závislost kvalitativních znaků, testování účinnosti biopreparátů.
- Lineární regrese, zjednodušený test linearity, testování koeficientů a odlehlosti bodů.
- Korelační analýza.
- Lineární regrese v kalibraci metod a určení chyb analýz.
- Dopad variability výsledků na určení meze stanovitelnosti.
- Nelineární regresní závislost, význam a typy funkcí jako modelů popisujících daný (bio)proces.
- Testování volby lineárních a nelineárních modelů.
- Dopad variability výsledků kinetických měření na vyhodnocení parametrů vybraných procesů v biochemii, fyziologii a biotechnologii.
- Variabilita v hodnocení růstu mikroorganismů a produkce metabolitů.

**Výukové metody:** Přednáška se stručnou teorií a dále založená na praktických příkladech z biochemie, chemie a biologie.

**Metody hodnocení:** Zkouška je písemná, založena na vyhodnocení praktických příkladů za použití materiálů z přednášky nebo jiných učebních textů.

**Literatura:**

- Michálek, Jaroslav. *Biometrika*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1982. 404 s. info
- Eckschlager, Karel - Horsák, Ivan - Kodejš, Zdeněk. *Vyhodnocování analytických výsledků a metod*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1980. 223 s. + l. info
- Murray, John. *Statistics*. 1st ed. London : R.C. Solomon, 1996. xi, 369 s. ISBN 0-7195-7088-3. info
- Doran, Pauline M. *Bioprocess engineering principles*. London : Academic Press, 1995. xiv, 439 s. ISBN 0-12-220856-0. info

### C7880 Separační metody II

**Vyučující:** [prof. RNDr. Zdeněk Glatz CSc.](#), [doc. RNDr. Oldřich Janiczek CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Cílem této přednášky je, aby studenti získali znalosti o separačních metodách využívaných v biochemii a molekulární biologii při separaci makromolekul (proteinů, nukleových kyselin). První část je věnována elektromigračním metodám. Druhá část je věnována chromatografickým metodám a třetí část Field Flow Fractionaci, superkritické fluidní chromatografii a hmotové spektroskopii.

**Osnova:**

#### A. Elektromigrační metody

1. Úvod do elektromigračních metod
2. Kapilární zónová elektroforéza
3. Izotachoforéza

4. Afinity elektroforéza
5. Detekce bílkovin po elektroforéze
6. Blotting
7. Elektroforéza nukleových kyselin

#### B. Field Flow Fractionation

#### C. Chromatografické metody

1. Mikrokolonová kapalinová chromatografie
2. Plynová chromatografie a GC MS
3. Superkritická fluidní chromatografie a extrakce

#### D. Hmotová spectrometrie

#### E. Aplikace afinitních interakcí při purifikaci bílkovin

**Výukové metody:** Dvouhodinové přednášky budou prezentovány interními a externími specialisty pro dané oblasti.

**Metody hodnocení:** Zkouška probíhá písemnou formou. Studenti dostávají test zahrnující otázky z přednášených technik separace makromolekul. Doba testu je 1 hodina. Klasifikace je A-F respektive "prospěl" nebo "neprospěl". Zkoušející doc. Janiczek.

#### Literatura:

- Weiss, Joachim. *Ion chromatography*. 2nd ed. Weinheim : VCH Verlagsgesellschaft, 1995. 465 s. ISBN 3-527-28698-5. info
- Foret, František - Krivánková, Ludmila - Boček, Petr. *Capillary zone electrophoresis*. Weinheim : VCH Publishers, 1993. 346 s. ISBN 3-527-30019-8. info
- *Handbook of capillary electrophoresis*. Boca Raton : CRC Press, 1994. 649 s. ISBN 0-8493-8690-. info
- *High performance liquid chromatography in biotechnology*. Edited by William S. Hancock. New York : John Wiley & Sons, 1990. 564 s. ISBN 0-471-82584-0. info
- Mikeš, O. *High-performance liquid chromatography of biopolymers and biooligomers. P. B, separation of individual compound classes*. Amsterdam : Elsevier, 1988. 721 s. ISBN 0-444-43034-2. info
- Li, Sam F. Y. *Capillary electrophoresis : principles, practice and applications*. Amsterdam : Elsevier, 1993. 582 s. ISBN 0-444-81590-2. info
- Rothe, Gunter M. *Electrophoresis of enzymes : laboratory methods*. Berlin : Springer-Verlag, 1994. 307 s. ISBN 3-540-58114-6. info
- *Gel electrophoresis of proteins : a practical approach*. Edited by David B. Hames - David Rickwood. 2nd ed. Oxford : Oxford University Press, 1990. xviii, 383. ISBN 0-19-963075-5. info
- Kitson, F. G. - Larsen, B. S. - McEwen, C. N. *Gas Chromatography and Mass Spectrometry, A Practical Guide*. San Diego : Academic Press, 1996. ISBN 0-12-483385-3. info
- Lindsay, Sandie. *High performance liquid chromatography*. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 1992. xxii, 337. ISBN 0-471-93180-2. info
- *Protein blotting : a practical approach*. Edited by Bonnie S. Dunbar. Oxford : Oxford University Press, 1994. 242 s. ISBN 0-19-963437-8. info
- Kuhn, Reinhard - Hoffstetter-Kuhn, Sabrina. *Capillary electrophoresis : principles and practice*. Berlin : Springer-Verlag, 1993. x, 375 s. ISBN 3-540-56434-9-. info
- Snyder, Lloyd R. - Kirkland, Joseph Jack - Glajch, Joseph L. *Practical HPLC method development [Snyder, 1997]*. 2nd ed. New York : John Wiley & Sons, 1997. xxvi, 765. ISBN 0-471-00703-. info
- Andrews, Anthony T. *Electrophoresis : theory, techniques and biochemical and clinical applications*. 1st pub. Oxford : Clarendon Press, 1990. xv, 452 s. ISBN 0-19-854632-7. info

#### C7895 Hmotnostní spektrometrie biomolekul

**Vyučující:** [doc. Mgr. Jan Preisler Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Student získá základy hmotnostní spektrometrie: ionizační metody, hmotnostní analyzátořy, iontové detektory. Důřaz bude kladen na porozumění hmotnostní spektrometrii biologických látek (ionizační metody MALDI, ESI) a moderní instrumentaci v hmotnostní spektrometrii (TOFMS, iontové pasti, FTMS).



## Osnova:

1. Stručná historie hmotnostní spektrometrie: Přehled metod a instrumentace. Základní koncepty MS (rozlišení, citlivost). 2. Ionizační metody a metody zavádění vzorku: Ionizace elektronovým nárazem (EI). Chemická ionizace (CI). Doutnavý výboj. Indukčně vázané plazma (ICP). Ionizace rychlými atomy (FAB). Ionizace (SIMS). Thermospray (TSI). Elektrospray (ESI). Laserová Desorpce (LD). Plazmová Desorpce (PD). Laserová desorpce za účasti matrice (MALDI). Spojení separace a hmotnostní spektrometrie (on-line, off-line, čipy). 3. Hmotnostní spektrometry: Základy iontové optiky. Simulace pohybu iontů (Simion). Energetické analyzátoři. Magnetický sektor. Quadrupólový analyzátor. Iontový cyklotron (FT-ICR-MS). Iontová past (IT). Lineární past (LT). Orbitrap. Time-of-Flight hmotnostní spektrometr (TOFMS). Kolizně indukovaná disociace (CID). Tandemová MS (MS/MS). Principy vakuové techniky. Detektory a detekční elektronika. 4. Aplikace MS: Proteiny a peptidy. Mapování peptidů, proteinové databáze. DNA. Sacharidy. Syntetické polymery.

**Výukové metody:** Přednášky a závěrečná diskuse.

**Metody hodnocení:** Závěrečná ústní zkouška (česky nebo anglicky)

## Literatura:

- Cotter, Robert J. *Time-of-Flight Mass Spectrometry: Instrumentation and applications in biological research*. Washington, D.C. : American Chemical Society, 1997. 326 s. ISBN 0-8412-3474-4. info
- Cole, Richard B. *Electrospray Ionization Mass Spectrometry: Fundamentals, Instrumentation & Applications*. : John Wiley & Sons, Inc., 1997. 577 s. ISBN 0-471-14564-5. info

## C7910 Metody chemického výzkumu

**Vyučující:** [doc. RNDr. Petr Zbořil CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Principy a instrumentace chemických a fyzikálních metod pro biochemický výzkum. Jejich aplikace při rutinních stanoveních látek a studium biochemických pochodů. Metodické přístupy při studiu chování biomolekul a jejich přeměn.

## Osnova:

1. Úvod. Zásady práce s biologickým materiálem. Strategie a plánování pokusů. Desintegrace tkání a buněk.
2. Centrifugace preparativní a analytická.
3. Fázové separace. Srážení a extrakce.
4. Membránové separace. Zahušťování a sušení. Čištění vody.
5. Chromatografické metody. Obecné principy a charakteristiky. Adsorpční a rozdělovací chromatografie.
6. Iontoměničová chromatografie a chromatofokusace. Gelová a afinitní chromatografie. Plynová chromatografie.
7. Hmotnostní spektrometrie.
8. Elektromigrační metody. Obecné charakteristiky, vedlejší efekty. Elektroforesa a její modifikace. Isotachoforesa.
9. Imunochemické metody.
10. Spektrální metody. Obecná charakterisace, rozdělení.
11. Elektronová spektra atomů a molekul. AES a AAS, užití v biochemii.
12. UV-VIS spektroskopie, princip, užití.
13. Typy přístrojů, diferenční a perturbační spektra. Turbidimetrie a nefelometrie.
14. Luminiscenční metody. Spektrofluorometrie, využití, omezení, instrumentace.
15. Biochemické aplikace, fluorescenční sondy, polarisační fluorescence.
16. IR a Ramanova spektroskopie.
17. Moessbauerova spektroskopie.
18. NMR a EPR, užití v biochemii.
19. Chiroptické metody. ORD a CD. Principy, význam, užití v biochemii.
20. Kalorimetrie, způsoby měření, druhy přístrojů, užití v biochemii.
21. Metody studia velikosti a tvaru biomakromolekul. isotopová výměna.
22. Koligativní metody, osmometrie a viskosimetrie.
23. Difúze translační a rotační.
24. Rozptyl světla a Roentgenova záření. Rentgenostrukturní analýsa.
25. Elektrochemické metody v biochemii. Principy, rozdělení.

26. Potenciometrie, ISE. Bioselektivní elektrody. 26. Amperometrické metody. Polarografie a voltametrie, biosensory.
27. Sledování rychlých pochodů, metody sledování, užití v biochemii.
28. Vazba ligandů na makromolekuly, typy, metody určování, vyhodnocení.

**Výukové metody:** Teoretická příprava.

**Metody hodnocení:** Přednáška. Zkouška písemná ev. navazující ústní.

**Literatura:**

- Anzenbacher, Pavel - Kovář, Jan. *Metody chemického výzkumu pro biochemiky*. 1. vyd. Praha : Ministerstvo školství ČSR, 1986. 199 s. info
- Kalous, Vítěz. *Metody chemického výzkumu*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1987. 430 s. info
- *Biofyzikální chemie*. Edited by Milan Kodíček - Vladimír Karpenko. 2. přeprac. a rozš. vyd. Praha : Academia, 2000. 337 s. ISBN 80-200-0791-1. info

### **C7920 Struktura a funkce proteinů**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Břetislav Brzobohatý CSc.](#), [prof. Mgr. Jiří Damborský Dr.](#), [doc. RNDr. Jaromír Marek Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Přednáška shrnuje základní poznatky o struktuře a funkci proteinů. V její první části jsou probrány strukturní motivy objevující se ve strukturách proteinů a je ukázáno jak mohou tyto motivy vytvářet proteiny se zcela odlišnými funkcemi. Ve druhé části jsou probírány vybrané biologické funkce proteinů a diskutována odlišná řešení struktur proteinů, která se vyvinula k naplnění dané funkce. Ve třetí části jsou uvedeny základní techniky strukturní biologie proteinů a jsou ukázány příklady cíleného inženýrování struktury a funkce proteinů.

**Osnova:**

1. Základní strukturní principy architektury proteinů. Stavební prvky proteinů. Motivы struktur proteinů. Doménová struktura proteinů. 2. Role jednotlivých strukturních motivů v biologické funkci proteinů. Proteiny interagující s DNA, transkripční faktory, receptory. Rozpoznávání cizorodých molekul imunitním systémem. Membránové proteiny, membránové receptory. Enzymová katalýza. Předpovídání, modelování a navrhování cíleného obměňování struktury proteinů. Metody stanovení trojrozměrné struktury proteinů. 3. Použití technik genového inženýrství pro studium vztahu struktury a funkce proteinů. Metody přípravy rekombinantních molekul DNA. Izolace a klonování genů. Genetické elementy řídící expresi genů. Stanovení sekvence DNA. Mutageneze in vitro. Produkce rekombinantních proteinů v heterologních expresních systémech.

**Výukové metody:** přednášky

**Metody hodnocení:** zk (examination). Alternate Types of Completion: k (colloquium).\*\*

**Literatura:**

- Branden, Carl - Tooze, John. *Introduction to protein structure*. 2nd ed. New York : Garland Publishing, 1998. xiv, 410 s. ISBN 0-8153-2304-2. info

### **C7925 Struktura a dynamika nukleových kyselin**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jiří Šponer DrSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Předmět rozšiřuje znalosti o struktuře nukleových kyselin. Zaměřuje se na 3D strukturu a její studium. Část přednášky je zaměřena na detailní popis prostorové struktury nukleových kyselin a jejich různých forem (kanonické formy, triplexy, kvadruplexy,...). Další část se týká počítačového modelování NK, zejména pomocí empirických metod založených na molekulové mechanice. Bude diskutována spolupráce s experimentálními metodami a využití Internetu při výzkumu struktury.

**Osnova:**

1. Historie výzkumu struktury, význam studia struktury a dynamiky, funkce nukleových kyselin. Definice pojmů pro nukleové kyseliny: báze, nukleosidy, nukleotidy, rozdíl DNA x RNA. 2. Schémata číslování atomů, popis struktury pomocí torzních úhlů, konformace cukru, glykosidická vazba. Interní x kartézské

souřadnice, helikální parametry x torzní úhly. 3. Různá párování bází, konformační polymorfismus (A, B, Z formy, lokální struktury). Víceřetězcové struktury. 4. Síly stabilizující NK: H--vazby, stacking, vliv iontů, vody. 5. Neobvyklé struktury NK: DNA --- triplexy, kvadruplexy, křížové formy. RNA --- ribozomy, ribozomy. Modifikované NK. 6. Interakce: NK a voda, NK a léčiva, NK a proteiny. Vyšší organizace DNA --- supercoiling, chromatin. 7. Výzkum struktury NK: RTG krystalografie, NMR spektroskopie, CD spektroskopie. Výpočetní metody --- přehled, srovnání. 8. Molekulové modelování NK: molekulová mechanika a dynamika (využití v NMR). Repräsentace solventu (PME, kontinuální modely). 9. Metodika MD: postupy a výstupy. Ekvilibrace, produkční fáze. Analýza výsledků. Tipy a triky. 10. Pokročilé metody: konformační prohledávání, quenched dynamics, LES, analýza volné energie. 11. Grafické znázornění molekul, možnosti zobrazovacího software ke znázornění vlastností molekul, Internetové zdroje strukturních informací. 12. Databáze struktur: NDB, PDB. Prohledávání podle různých kritérií, strukturní analýza na základě experimentálních dat.

**Výukové metody:** Přednášky, diskuze, praktické ukázky.

**Metody hodnocení:** 2h přednáška. Podle možností praktické ukázky modelovacího software, Internetových zdrojů. Zkouška bude probíhat formou písemného testu a diskuse nad jeho výsledky.

**Literatura:**

- Saenger, Wolfram. *Principles of nucleic acid structure*. New York : Springer-Verlag, 1983. xx, 556 s. ISBN 0-387-90761-0-. info
- *Oxford handbook of nucleic acid structure*. Edited by Stephen Neidle. Oxford : Oxford University Press, 1998. xv, 662 s. ISBN 0-19-850038-6. info

#### **C8140 Bioenergetika**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Igor Kučera DrSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (přif plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Student by měl získat ucelenou představu o hlavních typech energetických přeměn v živých buňkách, s důrazem na mechanismy spřažení chemických nebo fotochemických procesů s transportem přes biologické membrány. Měl by být rovněž schopen zdůvodnit volbu experimentální metody vhodné ke studiu konkrétního bioenergetického problému.

**Osnova:**

1) Historie rozvoje vědního oboru, náplň současné bioenergetiky. Přeměny energie v živých organismech: přehled, termodynamický popis. 2) Přehled makroergních sloučenin. Příklady mechanismů konservace energie na úrovni substrátu. 3) Biomembrány: lipidy, bílkoviny a jejich vzájemné interakce. Zjišťování struktury membránově vázaných bílkovin. 4) Mechanismy membránového transportu. Přenašeče, iontové kanály, ionofory. Membránové transportní ATPasy. Rotační katalýza u ATPasy translokující protony. 5) Enzymy, prostetické skupiny a elektronové přenašeče v bioenergeticky významných redoxních reakcích. 6) Elektrontransportní řetězce vázané na membránu. Metody studia elektrontransportních řetězců. Umělé donory a akceptory. Spřažení redoxních reakcí se vznikem protonového gradientu. 7) Isolace, ultrastruktura a metabolické aktivity mitochondrií. Transport proteinů, anorganických iontů a metabolitů přes mitochondriální membrány. 8) Mitochondriální respirace a oxidační fosforylace. 9) Aerobní respirace u chemoorganotrofních a chemolithotrofních bakterií. 10) Anaerobní respirace. Regulační mechanismy u fakultativních anaerobů. 11) Bakteriorhodopsinová fotosynthesa. Anoxygenní a oxygenní fotosynthesa závislá na (bakterio) chlorofylu, kooperace dvou fotosystémů v oxygenní fotosynthesě. 12) Vzájemná metabolická kooperace mitochondrií, chloroplastů a cytoplasmy. 13) Mechanochemické přeměny energie. Termogenese v hnědé tukové tkáni. Bioluminiscence. Bioenergetika sodného iontu. 14) Evoluce bioenergetických procesů. Bioenergetika a cykly biogenních prvků v přírodě.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** Jde o jednosemestrovou přednášku s výukou 2 hod týdně. U zkoušky (kolokvia) si student vylosuje trojici otázek, z nichž jedna je zaměřena na kvantitativní aspekty předmětu. Nejprve má vyhrazeno 1 hod na zpracování písemné přípravy, pak následuje pohovor.

**Literatura:**

- Dadák, Vladimír - Kučera, Igor. *Nové poznatky z bioenergetiky*. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1988. 128 s. skriptum. info
- Peusner, Leonardo. *Základy bioenergetiky*. 1. vyd. Bratislava : Alfa, 1984. 277 s. info

- Ferguson, Stuart J. - Nichols, David G. *Bioenergetics* 2. 1st ed. pub. London : Academic Press, 1992. 255 s. ISBN 0-12-518124-8. info
- Kučera, Igor. *Řešené úlohy z bioenergetiky*. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1985. 151 s. info

### C8150 Bioenergetika - seminář

**Vyučující:** [prof. RNDr. Igor Kučera DrSc.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Seminář má naučit studenty aplikovat fyzikálně chemické poznatky na kvantitativní problémy bioenergetiky. Zvýší si také svou zručnost při vědeckých výpočtech, zpracování a interpretaci experimentálních dat.

**Osnova:**

Řešení zadaných položek z obdržených souborů bioenergetických problémů: 1. Výměna energie mezi systémem a okolím 2. Energetický obsah živin 3. Termodynamika chemických reakcí 4. Termodynamika a kinetika membránového transportu 5. Protonmotivní napětí a jeho měření 6. Termodynamika a kinetika redoxních reakcí 7. Topologie respiračních řetězců 8. Energetické přeměny v buňkách

**Výukové metody:** Diskuse, domácí příprava

**Metody hodnocení:** Jednosemestrový seminář v rozsahu 2 hod týdně. Cílem je rozvoj schopností řešit kvantitativní problémy v bioenergetice. Jsou zadávány úlohy k samostatné domácí přípravě.

**Literatura:**

- Kučera, Igor. *Řešené úlohy z bioenergetiky*. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1985. 151 s. info

### C8160 Enzymologie

**Vyučující:** [prof. RNDr. Igor Kučera DrSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Studenti by měli získat základní představy o vlastnostech enzymů a vztahu mezi jejich strukturou a mechanismy katalytického působení. Měl by znát nejdůležitější zástupce jednotlivých tříd, oblasti jejich použití v praxi a základní metody stanovení enzymové aktivity. Předpokládá se, že zvládnou zpracování dat z kinetických studií a interpretaci výsledků ve vztahu k reakčnímu mechanismu.

**Osnova:**

1) Úvodní informace o enzymech Historie enzymologie. Stavba enzymů, pojmy holoenzym, apoenzym, kofaktor, koenzym, kosubstrát, prostetická skupina. Charakteristické rysy enzymové katalysy. Možnosti regulace enzymů in vivo. Mnohočetné formy enzymů (isoenzymy, konjugované enzymy, polymerní enzymy), multienzymy (multienzymové komplexy, polypeptidy). Názvosloví enzymů. 2) Enzymová aktivita Závislost rychlosti enzymové reakce na koncentraci enzymu a substrátu. Aktivita, molekulová aktivita, aktivita katalytického místa, katalytická koncentrace, specifické aktivita. Používání konvenčních jednotek enzymové aktivity. Přímé a nepřímé měření aktivity; spřažené enzymové reakce. Možnosti monitorování průběhu enzymové reakce; příklady syntetických substrátů pro fotometrii, fluorimetrii a luminometrii. 3) Isolace enzymů Živočišné, rostlinné a mikrobiální zdroje enzymů. Uvolňování intracelulárních enzymů z buněk, zahušťování extraktu, výběr separačních technik, konečné úpravy. Kvantitativní hodnocení purifikačního postupu. Krystalisace enzymů. Kriteria čistoty enzymových preparátů. Faktory ovlivňující stabilitu enzymových preparátů, možnosti stabilisace. 4) Chemické mechanismy enzymové katalysy Acidobasická katalysa, nukleofilní a elektrofilní katalysa. Kovalentní katalysa. Příklady účasti konkrétních aminokyselinových zbytků a kofaktorů. Radikálové reakce enzymů. Konvergence, divergence, paralelismus a zvrát funkce v evoluci katalytického mechanismu. 5) Termodynamika a kinetika přeměny substrátu na produkt Tvorba komplexu enzymu se substrátem. Energetický profil nekatalysované a katalysované reakce, možnosti ovlivnění aktivační energie. Kinetika reakčního mechanismu Michaelise a Mentenové (prestacionární stadium, stacionární a rovnovážné přiblížení). Rovnice Michaelise a Mentenové v diferenciálním a v integrovaném tvaru. Význam kinetických parametrů  $v_{max}$  (vlim),  $K_m$  a  $v_{max} / K_m$ . Reversibilní forma mechanismu Michaelise a Mentenové. Haldanův vztah. 6) Teoretické základy enzymové kinetiky Použití teorie grafů při odvozování kinetických rovnic ve stacionárním, rovnovážném a blokově rovnovážném přiblížení. Grafické a výpočetní metody analýsy experimentálních kinetických dat. Software pro enzymovou kinetiku. 7) Vliv faktorů prostředí na rychlost enzymové reakce Vliv teploty, pH, iontové síly a viskozity. 8) Inhibitory Typy reversibilní inhibice v Botts-Moralesově schématu a jejich diagnostika. Inhibice substrátem a produktem. Vysokoafinitní reversibilní inhibitory. Ireversibilní inhibice - afinitní

značení, inaktivace závislá na reakčním mechanismu. Analoga přechodového stavu. Farmakologický význam inhibitorů. Návrh nových účinných inhibitorů. 9) Vícesubstrátové reakce Klasifikace kinetických mechanismů vícesubstrátových reakcí. Clelandova symbolika. Kinetické rovnice. Experimentální rozlišení mezi jednotlivými mechanismy. Primární a sekundární grafy, inhibice produkty, analogy substrátů, isotopová výměna. 10) Kooperativní jevy při působení enzymů Definice kooperativity. Homeotropní a heterotropní kooperativita; allostérie. Určení stupně kooperativity. Hillova rovnice, Hillův koeficient. Fenomenologický rovnovážný model; Adairova rovnice. Molekulové modely Monod-Wyman-Changeux a Koshland-Nemethy-Filmer a jejich zobecnění. Asociace-disociace oligomeru. Kinetická kooperativita a kooperativita v monomerních enzymech. Pseudokooperativita a její možné příčiny. 11) Enzymy na pevných površích a v micelách Metody imobilisace enzymů. Vliv imobilisace na kinetické parametry, pH optimum, teplotní závislost aktivity a stabilitu enzymu. Kinetické modely reaktorů s imobilisovaným enzymem. Micelární systémy - příprava, kinetické vlastnosti, možnosti použití. 12) Enzymy v biochemické analytice Stanovení analytů s použitím rozpustných enzymů. Nerovnovážné metody (měření počáteční rychlosti, konverze na produkt za fixní čas, dvouenzymové a jednoenzymové recyklizační systémy), rovnovážné metody (do konečného bodu, isotopová výměna za rovnováhy). Enzymové biosensory - rozdělení podle měřené elektrické veličiny, analytické charakteristiky, příklady použití. Enzymová imunoanalýza. Enzymy jako markery genové exprese. 13) Další oblasti použití enzymů, enzymové inženýrství Nejdůležitější prakticky používané enzymy. Příklady uplatnění (potravinářství, krmivářství, výroba pracích prostředků, organická syntéza, medicína aj.). Extremofily jako zdroje enzymů. Využití strukturních dat k optimalisaci enzymové funkce. Cílená evoluce genů.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** Jde o jednosemestrovou přednášku s výukou 2 hod týdně. U zkoušky (kolokvia) si student vylosuje trojici otázek, z nichž jedna je zaměřena na kvantitativní aspekty předmětu. Nejprve má vyhrazeno 1 hod na zpracování písemné přípravy, pak následuje pohovor.

**Literatura:**

*doporučená literatura*

- Macholán, Lumír. *Enzymologie*. 2. upr. vyd. Brno : Vydavatelství Masarykovy univerzity, 1994. 152 s. ISBN 80-210-1039-8. info
- Kučera, Igor. *Řešené úlohy z enzymologie*. Brno : Rektorát UJEP, 1987. 121 s. info
- Kotyk, Arnošt - Horák, Jaroslav. *Enzymová kinetika*. 1. vyd. Praha : Academia, 1977. 268 s. info

**C8170 Enzymologie - seminář**

**Vyučující:** [doc. RNDr. Petr Skládal CSc.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Studenti absolvují praktické procvičování poznatků z enzymologie. Naučí se tvořit systémové názvy enzymů. Vypočítají enzymové aktivity a určí typ a parametry enzymové kinetiky. Porozumí bioanalytickým aplikacím enzymů včetně souvisejících výpočtů.

**Osnova:**

1. Názvosloví enzymů a enzymová aktivita. 2. Metody měření enzymové aktivity I - fotometrie. 3. Metody měření enzymové aktivity II - spotřeba kyslíku, pH stat, vývoj plynu, aj. 4. Purifikace enzymů a její hodnocení. 5. Kinetika jednosubstrátové enzymové reakce, rovnice Michaelise-Mentenové. 6. Zjišťování kinetických parametrů z experimentálních dat, integrovaná rovnice Michaelise-Mentenové. 7. Vliv pH na kinetiku enzymové reakce. 8. Inhibice. 9. Vícesubstrátové reakce. 10. Kooperativní jevy při působení enzymů. 11. Imobilizované enzymy. 12. Bioanalytické aplikace enzymů. 13. Enzymy v imunochemických stanoveních.

**Výukové metody:** semináře, praktické procvičování učiva probíraného na přednášce z enzymologie, zejména výpočty

**Metody hodnocení:** zápočet

**Literatura:**

- Kučera, Igor. *Řešené úlohy z enzymologie*. Brno : Rektorát UJEP, 1987. 121 s. info

**C8210 Diplomová práce II (BC)**

**Vyučující:** [doc. RNDr. Oldřich Janiczek CSc.](#)



**Rozsah:** 0/0/10. 10 kr. Ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Témata vypsaná učiteli Ústavu biochemie a Národního centra pro výzkum biomolekul v rozpisech.

**Osnova:**

Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

**Výukové metody:** Samostatná práce studentů pod vedením školitele. Studium odborné literatury, experimentální práce v laboratoři, osobní konzultace s vedoucím práce.

**Metody hodnocení:** Zápočet je udělený za úspěšný postup v přípravě práce.

**Literatura:**

- Voet, Donald - Voet, Judith G. *Biochemistry*. 3rd ed. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2004. xv, 1591 s. ISBN 0-471-41761-0. info

### **C8800 Rtg strukturní analýza**

**Vyučující:** [doc. RNDr. Jaromír Marek Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Na konci tohoto kurzu bude student schopen porozumět a vysvětlit základní principy monokrystalové rtg. strukturní analýzy. Kromě teorie monokrystalové difrakce se zde ale věnujeme i přístroj. výbavě používané při difrakčním experimentu a metodám používaným při vyhodnocování experimentálních dat. Na rozdíl od analogického kursu CB070 Proteinová krystalografie je základní pozornost kursu C8800 soustředěna na krystalografii tzv. malých molekul.

**Osnova:**

- Symetrie látek
- Interakce rtg. záření s látkou
- Difrakce na krystalu
- Zdroje a detektory rtg. záření
- Difraktometry
- Fázový problém
- Pattersonovské a přímé metody
- Upřesňování modelu, R-faktory, metoda nejmenších čtverců.
- Programy SHELXS a SHELXL
- Příprava proteinových krystalů
- Proteiny a metody kovových derivátů
- Upřesňování proteinových strukturních modelů
- Krystalografické databáze

'Výukové metody'

**Metody hodnocení:** Během semestru je vyžadována domácí práce na počítači. Ústní zkouška či kolokvium

**Literatura:**

- Marek, Jaromír - Trávníček, Z. *Monokrystalová rentgenová strukturní analýza*. první. Olomouc : Vydavatelství Univerzity Palackého, 2002. 169 s. nedělí se na edice. ISBN 80-244-0551-2. info
- Giacovazzo, C. *Fundamentals of Crystallography*. 1992. ISBN 0-19-855578-4. info

### **C8801 Krystalografie biomakromolekul**

**Vyučující:** [doc. RNDr. Michaela Wimmerová Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Předmět je zaměřen na 3D strukturu biomakromolekul (proteinů a nukleových kyselin) a její studium pomocí rentgenové krystalografie. Část přednášky je věnována popisu symetrie a přípravy krystalů. Další část principům difrakce rtg. záření a sběru a zpracování difrakčních dat. Poslední část zahrnuje metody řešení a upřesňování 3D struktury biomakromolekul. V závěru budou zahrnuty praktické ukázky krystalizace proteinu a práce s krystalografickým software.

**Osnova:**

1. Krystaly Symetrie krystalů, bodové a prostorové grupy, základní buňka. 2. Příprava a purifikace proteinů, krystalizační experiment, posuzování kvality krystalů. 3. Geometrické principy difrakce I. Braggův zákon, reciproká mřížka, Ewaldova konstrukce. 4. Geometrické principy difrakce II. Teplotní faktor, symetrie základní buňky, intenzita difrakce. 5. Sběr difrakčních dat I. Zdroje rtg záření, detektory. 6. Sběr difrakčních dat II. Difrakční experiment, zpracování difrakčních snímků. 7. Získávání map elektronových hustot z difrakčních dat Atomový rozptylový faktor, strukturní faktory a jejich 2D reprezentace, amplituda a fáze strukturního faktoru, Fourierova transformace strukturních dat do elektronové hustoty. 8. Řešení fázového problému I. Metoda molekulárního nahrazení (rotační a translační funkce), metoda izomorfního nahrazení, příprava derivátů s atomy těžkých kovů, Pattersonovy mapy. 9. Řešení fázového problému II. Metoda anomálního rozptylu, upřesňování map elektronových hustot (vyhlazování solventu, průměrování molekul, použití histogramů). 10. Získávání a upřesňování strukturního modelu I. Upřesňování rigidní struktury (rigid body refinement), metoda nejmenších čtverců (energetické a stereochemické vazné podmínky). 11. Získávání a upřesňování strukturního modelu II. Teplotní faktory, molekulová dynamika a simulované žhání. 12. Stavba modelu, diferenční hustotní mapy, OMIT mapy. 13. Kontrola správnosti strukturního modelu R-faktory, Ramachandranův graf, B-faktory, Luzzatiho diagram. 14. Praktická část

'Výukové metody'

**Metody hodnocení:** 2h přednáška. Podle možností praktické ukázky krystalizace biomolekul, krystalografického software, Internetových zdrojů. Podmínkou pro vykonání zkoušky je teoretická znalost metod krystalizace, získání a zpracování difrakčních snímků a metod určení 3D struktury biomolekul.

**Literatura:**

- Rhodes, Gale. *Crystallography made crystal clear : a guide for users of macromolecular models*. San Diego : Academic Press, 1993. xiii, 202. ISBN 0-12-587075-2. info
- McPherson, Alexander. *Preparation and analysis of protein crystals*. Malabar : Krieger Publishing Company, 1989. 371 s. ISBN 0-89464-355-. info
- Drenth, Jan. *Principles of protein X-ray crystallography*. New York : Springer-Verlag, 1994. xiii, 311. ISBN 0-387-94091-. info

### C8855 Počítačová chemie a molekulové modelování II

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#), [Mgr. Zdeněk Kříž Ph.D.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 2 kr. Doporučované ukončení: k. Jiná možná ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Kurs je zaměřen na získání pokročilých znalostí v oblasti výpočetní chemie. Jeho orientace je výrazně aplikační. Student získá přehled o metodách analýzy komplikovaných energetických prostorů, metodách simulujících dynamiku molekul, metodách umožňujících studovat molekulární komplexy a chemické reakce. V neposlední řadě se student seznámí s různými způsoby, jak do výpočtu zahrnout solvent. V závěru se studenti seznámí s některým uživatelsky příjemným programovým balíkem pro počítačové modelování molekul a molekulárních systémů.

**Osnova:**

1. Hyperplochy potenciální energie (PES). Význam a charakteristika stacionárních bodů. Základní algoritmy pro jejich vyhledávání. 2. Simulace chování molekulárního systému. Molekulová dynamika a metody Monte Carlo. 3. Konformační změny a jejich počítačové studium. Řešení problému mnohonásobných minim v konformační analýze. Energetické bariery konformačních interkonverzí. 4. Úvod do počítačového studia supramolekul, molekulárních komplexů a biomolekul. Dokování molekul. Design nových molekul. 5. Modelování solventu. 6. Modelování chemických reakcí. 7. Programové systémy Insight II, AMBER, DISCOVER, Oxford Molecular, WHATIF, AUTODOCK.

**Výukové metody:** Přednášky kombinované s diskusí nad projekty.

**Metody hodnocení:** Kurs sestává ze sedmi dvouhodinových přednášek. Ty jsou přednášeny samotnými frekventanty kursu na základě předběžné domluvy s vyučujícím. Pro ty studenty, kteří si zapsali cvičení, pak následuje samostatný projekt, který má ve většině případů úzký vztah k odbornému zaměření studenta.

**Literatura:**

- Lipkowitz, K B - Boyd, D B. *Reviews in Computational Chemistry 1-9*. New York : VCH Publishers, 1998.
- Hehre, Warren J. - Shusterman, Alan J. - Huang, W. Wayne. *A laboratory book of computational organic chemistry*. Irvine, Calif. : Wavefunction, 1996. xiv, 291 s. ISBN 0-9643495-5-8. info

- Foresman, J B - Frisch, A. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Pittsburgh : Gaussian, Inc., 1996. info
- Jensen, Frank. *Introduction to Computational Chemistry*. New York : J. Wiley & Sons Ltd., 1999. info

### C8856 Počítačová chemie a molekulové modelování II cvičení

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jaroslav Koča DrSc.](#)

**Rozsah:** 0/1/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: z. Jiná možná ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Samostatny projekt v pokrocile vypocetni chemii.

**Osnova:**

Student si voli pokrocily samostatny project po konzultaci s vyucujcim.

**Výukové metody:** Práce na projektu.

**Metody hodnocení:** Diskuse o projektu, protokol

**Literatura:**

- *Encyclopedia of computational chemistry*. Edited by Paul von Ragué Schleyer. Chichester : John Wiley & sons, 1998. xxix, s. 2. ISBN 0-471-96588-X. info
- Dle potreb projektu

### C8857 Protein Preparation and Characterization III - Protein-Mediated Interaction

**Vyučující:** [Mgr. Lumír Krejčí Ph.D.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (plus 2 za zk). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** The main aim of the course is to discuss the role of protein-mediated interactions in the biology of the cell. Examples of protein-ligand, protein-protein and protein-DNA interactions and motifs responsible for such interactions will be presented in the context of their biological significance. The course will also include theory of individual methods used for study of protein-mediated interactions.

**Osnova:**

1) General concept DNA RNA PROTEIN; Proteins - their structure, assmebly, and folding; Mad cow and other disease; Domains and motifs; Predictions. 2) Why and how do the proteins interact; Little bit of Math; Data mining; Protein localization (NLS), membrane transport , transport in cytosol etc.); Role of protein interactions (cell cycle, enviroment and hormon responses). 3) Modification of protein interactions, their role and types (phosphorylation, Ubq, Sumo, glycosilation, 4) DNA-protein interactions, types of interaction motifs, their roles (replication, transcription, repair), modification again 5) Methods of study (microscopy, Y2H, FRET, in vitro /pulladow). 6) Methods II (IP,CHIP, far western, EMSA, Biocore etc.). 7) Single protein versus complex of proteins. 8) Examples: DNA repair mechanisms, from single protein to multi-protein complexes. 9) DNA repair II

**Výukové metody:** The course will be taken in block during the semester. The teaching language is english. Each lecture will consist of summary of previous lecture, actual lecture and case examples. Special focus will be given for group discussions.

**Metody hodnocení:** The course will be ended by test. Each student will have to also deliver home assignment that describes their particular project with the potential implementation of the methods and techniques discussed during the course.

**Literatura:**

- Meyers., Robert A. *Encyclopedia of Molecular Cell Biology and Molecular Medicine, 2nd Edition*. 2004. ISBN 3-527-30545-9. info
- Branden, Carl - Tooze, John. *Introduction to Protein Structure*. 1991. ISBN 0-8153-0270-3. info

### C8857c Protein Preparation and Characterization III - practice

**Vyučující:** [Mgr. Lumír Krejčí Ph.D.](#)

**Rozsah:** 0/2/0. 3 kr. (plus ukončení). Ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** The practical course will focus on simple and basic methodology allowing students to monitor or characterize protein-mediated interactions. The spectrum of methods will include study of protein-protein interaction by in vitro pull-down assay using purified proteins or in vivo using yeast 2-hybrid method. Example



of complex protein interactions will be presented on posttranslational modification by SUMO protein. Protein-DNA interactions will be monitored by electrophoretic mobility shift assay. To study mobile enzymes on a DNA, the ability of helicases to translocate on separate DNA strands will be monitored.

**Osnova:**

1. Protein-protein interactions and post-translational modification a) pull-down b) sumoylation c) two-hybrid
2. Protein-DNA interaction and 2-hybrid a) EMSA b) 2-hybrid c) data evaluation
3. Protein-DNA interaction a) helicase assay b) data evaluation

**Výukové metody:** Each day will start with theoretical section describing the background and use of the individual methods. The students will be then divided in group of two and they will perform all tasks practically based on available protocol.

**Metody hodnocení:** Each practical course will be evaluated based on the written protocols including control question. To pass the practical course each students has to successfully complete 3/4 of all experiments.

**Literatura:**

- Meyers., Robert A. *Encyclopedia of Molecular Cell Biology and Molecular Medicine, 2nd Edition.* 2004. ISBN 3-527-30545-9. info

**C8862 Výpočty volných energií - cvičení**

**Vyučující:** [RNDr. Petr Kulhánek PhD.](#)

**Rozsah:** 0/1. 1 kr. Ukončení: z.

**Cíle předmětu:** Kurz je zaměřen na získání základních znalostí v oblasti výpočtů volných energií pomocí metod výpočetní chemie. Student si prakticky vyzkouší vybrané metody probírané na přednášce na modelových systémech.

**Osnova:**

- volné energie metodami koncových stavů
- solvatační volné energie pomocí termodynamické integrace
- volná energie konformačních přeměn pomocí metod potenciálu střední síly

**Výukové metody:** praktické cvičení

**Metody hodnocení:** Zápočet je udělen za dokončení projektu a jeho obhájení. Účast je povinná (povolené jsou dvě dopředu omluvené absence).

**Literatura:**

- Leach, Andrew R. *Molecular modelling :principles and applications.* 2nd ed. Harlow : Prentice Hall, 2001. xxiii, 744. ISBN 0-582-38210-6. info
- *Free energy calculations :theory and applications in chemistry a biology.* Edited by Christophe Chipot - Andrew Pohorille. Berlin : Springer, 2007. xviii, 517. ISBN 978-3-540-38447. info
- Cramer, Christopher J. *Essentials of computational chemistry :theories and models.* 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 2004. xx, 596 s. ISBN 0-470-09181-9. info

**C8863 Výpočty volných energií**

**Vyučující:** [RNDr. Petr Kulhánek PhD.](#)

**Rozsah:** 2/0. 2 kr. (plus 1 za zk). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Kurz je zaměřen na získání základních znalostí v oblasti výpočtů volných energií pomocí metod výpočetní chemie. Student získá přehled o dostupných metodách, jejich přednostech a nevýhodách. Nabyté znalosti by měly být dostačující k samostatné aplikaci nabytých znalostí k řešení reálných problémů z oblasti chemie, supermolekulární chemie či biochemie.

**Osnova:**

1. Co je to volná energie a její postavení v termochemii a kinetice. Experimentální metody měření. Statistická fyzika a volná energie.
2. Stručný přehled vybraných metod výpočetní chemie. Monte-Carlo simulace versus molekulová dynamika. Metody výpočtu potenciální energie (ab initio metody, molekulová mechanika). Rozdíl mezi plochami potenciální (PES) a volné energie (FES).

3. Přehled metod výpočtů volné energie. Metody koncových stavů, alchemické přeměny, metody potenciálu střední síly. Speciální metody.
4. Metody koncových stavů. Použití statistických metod pro lokální extrémy na PES. MM/PB(GB)SA. Výpočet solvatačních volných energií. Výpočet entropických příspěvků.
5. Alchemické přeměny. Free energy perturbation. Termodynamická integrace. Problémy se zánikem a vytvářením atomů. Soft-core potenciál. Staging versus sampling.
6. Metody potenciálu střední síly (PMF). Vzorkovací problém. Přehled metod. Metoda Adaptive Biasing Force. Metoda Blue Moon. Umbrella Sampling. Metodynamika. Metoda více chodců.
7. Speciální metody. Metody zlepšující vzorkování. Replika-exchange molekulová dynamika, atd.

**Výukové metody:** přednáška, diskuze

**Metody hodnocení:** Kurz je zakončen písemným testem, který je následován ústní zkouškou.

**Literatura:**

- Leach, Andrew R. *Molecular modelling :principles and applications*. 2nd ed. Harlow : Prentice Hall, 2001. xxiii, 744. ISBN 0-582-38210-6. info
- *Free energy calculations :theory and applications in chemistry a biology*. Edited by Christophe Chipot - Andrew Pohorille. Berlin : Springer, 2007. xviii, 517. ISBN 978-3-540-38447. info
- Cramer, Christopher J. *Essentials of computational chemistry :theories and models*. 2nd ed. Chichester : John Wiley & Sons, 2004. xx, 596 s. ISBN 0-470-09181-9. info

### C8950 NMR - Strukturní analýza

**Vyučující:** [prof. RNDr. Radek Marek Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** NMR spektroskopie jako jedna z nejdůležitějších strukturně-analytických metod zaujímá významné místo ve výzbroji každého chemika. Předmět NMR strukturní analýza by měl absolventovi umožnit základní orientaci v problematice řešení struktury přírodních produktů a organických sloučenin pomocí vysokorozlišovací NMR spektroskopie. Hlavní důraz je kladen na interpretaci a extrakci informací ze základních typů 2D spekter (COSY, NOESY, HSQC, HMBC).

**Osnova:**

**1. Některé aspekty NMR** - úvod, metody magnetické rezonance, vznik NMR signálu, typy jaderných interakcí, chemický posun, interakční konstanta, příklady, Fourierova transformace - relaxace jader (inversion recovery), selektivní excitace, potlačení signálu rozpouštědla, NOE; **2. Konstrukce spektrometrů** - magnety, sondy, kyvety a propojení s HPLC, MS; **3. Editační techniky** - spinové echo, APT - přenos polarizace, INEPT, DEPT; **4. NMR spektroskopie ve více dimenzích - homonukleární korelace** - korelační spektroskopie (COSY) - interakce dalekého dosahu (LR-COSY, Relayed COSY) - TOCSY; **5. Heteronukleární korelace** - jednovazebné (HETCOR) - dalekého dosahu (LR-HETCOR, COLOC); **6. Měření J konstant** - J spektroskopie - jiné techniky-korelace chemických posunů, časová doména; **7. Interakce dipól-dipól** - selektivní NOE - 2D NOESY; **8. Vícekvantová spektroskopie** - MQF-COSY - INADEQUATE; **9. NMR spektroskopie jiných jader než <sup>1</sup>H a <sup>13</sup>C** - <sup>15</sup>N, <sup>31</sup>P, <sup>77</sup>Se (<sup>19</sup>F, <sup>29</sup>Si, <sup>111</sup>Cd a <sup>113</sup>Cd, <sup>117</sup>Sn a <sup>119</sup>Sn, <sup>125</sup>Te, <sup>195</sup>Pt a <sup>207</sup>Pb); **10. Inverzní experimenty** - jednovazebné (HMQC, HSQC) - dalekého dosahu (HMBC, HSQC) - kombinované techniky (HMQC-TOCSY, HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY); **11. Gradientní NMR spektroskopie** - homokorelační spektroskopie - NOESY - heterokorelační inverzní metodiky; **12. Nepřímá spin-spinová interakce a přímá interakce dipól-dipól - informace pro řešení prostorové struktury molekul** - J konstanty a informace o dihedrálních úhlech - NOE a meziatomové vzdálenosti - vstupní data pro molekulovou mechaniku; **13. Praktické aspekty** - typy sond, logická struktura analýzy, citlivost experimentů; **14. Praktické příklady a interpretace spekter**

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** výuka probíhá každý týden, zakončení zkouškou s písemnou event. ústní částí.

**Literatura:**

*povinná literatura*

- Claridge, Timothy D.W. *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*: Pergamon, 1999 382s. ISBN 0-08-0427987

*doporučená literatura*

- Rahman, Atta-ur-. *Solving problems with NMR spectroscopy*. Edited by Muhammad Iqbal Choudhary. San Diego : Academic Press, 1995. xvi, 430 s. ISBN 0-12-066320-1. info
- Rahman, Atta-ur-. *One and Two Dimensional NMR Spectroscopy*. 1. vyd. Amsterdam : Elsevier Science Publishers B.V., 1989. 578 s. ISBN 0-444-87316-3. info
- Breitmaier, Eberhard. *Structure elucidation by NMR in organic chemistry : a practical guide*. Translated by Julia Wade. Chichester : John Wiley & Sons, 1993. 265 s. ISBN 0-471-93381-3. info

*neurčeno*

- Braun, Siegmund - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *150 and more basic NMR experiments : a practical course*. 2nd exp. ed. Weinheim : Wiley-VCH, 1998. 595 s. ISBN 3-527-29512-7. info
- Braun, Siegmund - Kalinowski, Hans - Otto - Berger, Stefan. *100 and more basic NMR experiments : a practical course*. Weinheim : VCH Verlagsgesellschaft, 1996. xii, 418 s. ISBN 3-527-29091-5. info
- <http://staffold.vscht.cz/nmr/subpages/predmet.html>

### **C8951 NMR spektroskopie pevného stavu - základní principy a aplikace v chemii.**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Radek Marek Ph.D.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Dvanáct lekcí přibližuje posluchačům nejenom základní principy NMR spektroskopie pevného stavu, ale především současné trendy, které umožňují detailní posouzení struktury a dynamiky látek v tuhém stavu. Nedávný technický a metodický rozvoj vedl k navržení řady nových experimentálních postupů, které vedou k odstranění anizotropie jaderných interakcí a podstatnému zvýšení rozlišení NMR spekter. Tato spektra jsou pak mnohdy svou kvalitou srovnatelná s NMR spektry roztoků a kapalin. Základním principům těchto technik jsou věnovány úvodní přednášky. Největší prostor je však věnován více-dimenzionálním korelačním a separačním technikám, které nevyžadují izotopické obohacení studovaného materiálu, a které v některých případech umožňují přesný popis molekulární struktury, konformace a pohyblivosti jednotlivých strukturních jednotek. Stranou však nezůstávají ani experimentální techniky umožňující popis globální struktury izotopicky obohacených polypeptidů a proteinů. Závěrečné přednášky jsou pak věnovány problematice studia kvadrupolárních jader se spinem větším než a technickým (experimentálním) podmínkám, jejichž splnění je nezbytně nutné pro kvalitní provedení NMR experimentu v tuhé fázi.

**Osnova:**

**1. Úvod do NMR pevné fáze:** Základní přehled jaderných (anizotropních) interakcí s magnetickým polem a jejich důsledek na vzhled (rozšíření) NMR spekter. Základní principy rušení anizotropních jaderných interakcí (rotace vzorku pod magickým úhlem MAS, dipolární dekapling). Rozdíly a podobnosti NMR spekter roztoků a tuhých látek (homogenní a nehomogenní rozšíření signálů prvek neuspořádání). Rotace vzorku třením povrchu kyvety se vzduchem vzrůst teploty. **2. Detailní rozbor anizotropie jaderných interakcí techniky rušení jaderných interakcí:** Detailní popis jaderných interakcí: anizotropie chemického posunu (CSA), dipol-dipolové interakce (přímé přes prostor), kvadrupolární interakce. Rozbor technik rušení jaderných interakcí: rotace vzorku pod magickým úhlem (MAS), heteronukleární dipolární decoupling (cw, TPPM, XiX), homonukleární dipolární decoupling (WHH-4, BR-24, FSLG, PMLG), dvojitá rotace (DOR, DAS). **3. Techniky přenosu polarizace:** Heteronukleární ( $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ -X) přenos polarizace; zvýšení citlivosti měření pomocí cross-polarizace (CP) dynamika přenosu polarizace; Hartmann-Hahnova podmínka vliv frekvence MAS na citlivost a nastavení parametrů měření. Problematika CP jader se spinem větším než . Homonukleární přenos polarizace spinová difuze  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  (vhodná sonda k posouzení velikosti částic v heterogenních systémech). **4. Techniky editace jedno-dimenzionálních spekter:** Možnosti potlačení rotačních signálů (TOSS, SELTICS); potlačení signálů uhlíků s přímo-vázanými protony v důsledku rychlé ztráty  $^{13}\text{C}$  koherence (NQS); editační techniky založené na vlivu různé velikosti  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  heteronukleárních dipolárních interakcí ve skupinách C, CH,  $\text{CH}_2$ , a  $\text{CH}_3$  při cross-polarizaci (CPPI); vliv pohyblivosti funkčních skupin a segmentů; editační techniky založené na velikosti a vývoji nepřímé J spin-spinové interakce (SoS-APT); různé možnosti manipulace se spinovým systémem (vývoj jedno- kvantové a více- kvantové koherence). Aplikace na jednoduchých i komplikovaných spinových systémech (např. Gly, Ala, simvastatin). **5. Separace širokých čar struktura vs. segmentální dynamika:** Jednoduchá separace  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  dipolárních interakcí podle  $^{13}\text{C}$  chemického posunu kvalitativní posouzení segmentální dynamiky; zavedení periody pro spinovou difuzi (stanovení velikosti částic v heterogenních systémech); určování pozice molekul vody. Separace heteronukleárních  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  dipolárních interakcí podle  $^{13}\text{C}$  chemického posunu kvantitativní posouzení segmentální dynamiky amplituda reorientace funkční skupiny. Aplikace na polymerních směsích (polyethylenoxid-polykarbonát), sítích (polyimid-polydimethylsiloxan), polypeptidech, nanokompozitech a anorganických materiálech. **6. Heteronukleární  $^1\text{H}$ -X korelační**

**experimenty:** Přímé korelace přes prostor využití dipol-dipolových interakcí; jedno-vazebné korelace; identifikace vzdálených spinových párů; možnost měření meziatomových vzdáleností (3D HETCOR); porovnání selektivity a citlivosti s korelačními experimenty využívající nepřímé spin-spinové interakce ( $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HMQS-*J*-MAS). Možnosti inverzní detekce a gradientového výběru koherencí. Aplikace na středně velkých spinových systémech simvastatin. **7. Homonukleární  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  korelační experimenty:** Proč je tak komplikované provést experiment COSY v pevné fázi, když v roztoku je tím nejjednodušším a nejzákladnějším korelačním experimentem? Problém relativně malého spektrálního rozlišení. Spinová difuze během směšovací periody místo vývoje *J* interakčních konstant posouzení homogenity či mísitelnosti směsí. Určení velikosti částic, ale i meziatomových  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  vzdáleností. Zvýšení spektrálního rozlišení v 3D experimentu  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ . Aplikace na polymerních komplexech a polymerních směsích, středně velkých spinových systémech (simvastatin) a malých organických molekulách. **8. Dvou-quantové  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  korelační techniky - vodíkové vazby a *pi-pi* interakce** Ultra-rychlé rotace vzorku pod magickým úhlem podstatně zvýšení spektrálního rozlišení (vážným omezením je extrémní zvýšení teploty vzorku); princip excitace dvou-quantové koherence a její následné konverze (back-to-back BABA sekvence). Měření meziatomových  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  vzdáleností. **9. Zvýšení spektrálního rozlišení X-X a X-Y korelace:** INADEQUATE v přirozeném izotopickém zastoupení; optimalizace heteronukleárního decouplingu transverse dephasing optimized INADEQUATE; DQF-COSY jednoduchá modifikace symetrické spektrum. Techniky vhodné pro případy úplného izotopického obohacení vzorku: především to je  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  PDS proton-driven spin diffusion, dále pak dvou-quantové modifikace užívající C7 a PC7 sekvence. Základní koncept dvojitého cross-polarizací, potlačení zpětného přenosu polarizace do  $^1\text{H}$  spinového systému Lee-Goldburg decoupling. **10. Techniky sekvenčního přiřazení polypeptidů a proteinů, určení struktury:** Diskuse základních experimentálních postupů, jež vedou k sekvenčnímu přiřazení signálů a následnému měření meziatomových vzdáleností, případně i torzních úhlů v proteinech a peptidech. 2D a 3D techniky pro určení intra-reziduální spinové konektivity C-C $^{\alpha}$ -C $^{\beta}$  a N-C $^{\alpha}$ -C $^{\beta}$  a inter-reziduální konektivity C $^{\alpha}$ -C $^{\beta}$  a N-C $^{\alpha}$ -C $^{\beta}$ . Volba směšovací periody. Využití přístupů běžných v NMR roztoků (NOE). Příprava vzorku. **11. Kvadrupolární jádra:** Kvadrupolární spektra rozšíření spekter druhého řádu; multi-quantové dvou-dimenzionální techniky vedoucí k částečné separaci kvadrupolové interakce a zvýšení spektrálního rozlišení; použití z-filtru; měření plného echa a další modifikace (např. FAM); vliv frekvence MAS; vliv intenzity magnetického pole a vliv intenzity excitačních polí na kvalitu výsledných 2D spekter. Korelační experimenty zahrnující kvadrupolová jádra ( $^1\text{H}$ - $^{27}\text{Al}$ ,  $^{29}\text{Si}$ - $^{27}\text{Al}$ ). **12. Technické aspekty úspěšného provedení NMR experimentu v pevné fázi:** Konstrukce sondy - teplotní rozsahy a kalibrace teplot; dvou-rezonanční sondy optimalizace (wobb); tří-rezonanční sondy vyměnitelný insert; ladění magického úhlu; optimalizace homogenity B0 pole - shimming; výkony excitačních a dekaplovacích polí minimální opakovací prodlevy; lineární zesilovače; základní specifikace prodlevy, pulsy, fáze; typy rotorů omezení a výhody.

**Výukové metody:** Přednášky

**Metody hodnocení:** zkouška ústní

**Literatura:**

- Melinda J. Duer, Solid-state NMR Spectroscopy: Principles and Applications. Blackwell Science, Oxford, 2002, ISBN 0-632-05351-8.

### C9085 Protein-RNA interactions

**Vyučující:** [Mgr. Richard Štefl Ph.D.](#)

**Rozsah:** 1/0/0. 1 kr. (plus 2 za zk). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** The course will provide an overview on how proteins interact with RNAs. Different modes of interactions as well as their importance for biological functions will be discussed. In addition, the course will highlight advantages and disadvantages of various techniques when applied to protein-RNA complexes.

**Osnova:**

1. A Brief introduction to chemical structure of RNAs and proteins
2. A Brief introduction to basic structural motifs of RNAs and proteins
3. Introduction to protein-RNA interactions
4. RNA sequence-dependent recognition by proteins
5. RNA structure-dependent recognition by proteins
6. Experimental methods for structural determination of protein-RNA complexes
7. Biochemical methods for characterization of protein-RNA complexes
8. Known mechanistic pictures on how the interactions between Proteins and RNAs mediate gene expression and its regulation.

**Výukové metody:** lectures & class discussions

**Metody hodnocení:** přednášky, diskuse v hodině, ústní zkouška

## Literatura:

- Voet, Donald - Voet, Judith G. *Biochemistry*. 3rd ed. Hoboken : John Wiley & Sons, 2004. xv, 1591 s. ISBN 0-471-39223-5. info

## C9100 Biosenzory

**Vyučující:** [doc. RNDr. Petr Skládal CSc.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Doporučované ukončení: zk. Jiná možná ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Přednáška pro studenty magisterského a doktorantského studia. Definice, přehled a charakteristiky biosenzorů. Elektrochemické a optické biosensory. Sensory založené na afinitních interakcích. Piezoelektrické a kalorimetrické sensory. Technologie biosenzorů, imobilizační postupy. Problémy miniaturizace a masové produkce biosenzorů. Aplikace biosenzorů v klinické analýze, životním prostředí.

### Osnova:

1. Definice biosenzoru. Historický přehled. Charakteristiky ideálního biosenzoru. Základní měřicí přístupy.
2. Elektrochemické biosensory, enzymové elektrody. Potenciometrické systémy a ISFETy. Referenční elektrody.
3. Amperometrické měření kyslíku, peroxidu vodíku a NADH, biosensory s oxidázami a dehydrogenázami.
4. Přenos elektronů z enzymů na elektrodu pomocí mediátorů. Kompozitní a organokovové molekuly.
5. Měření impedance a konduktometrické biosensory. Voltametrické techniky.
6. Spektrofotometrické, fluorimetrické a chemiluminiscenční sensory, optická vlákna. Optické biokatalytické sensory. Bioluminiscence.
7. Biosensory pro detekci inhibitorů. Recyklační enzymové systémy.
8. Mikrobiální, tkáňové a receptorové sensory.
9. Afinitní biosensory s nepřímou detekcí pomocí značek. Imunosensory.
10. Hybridizační biosensory pro stanovení nukleových kyselin a detekci sekvencí oligonukleotidů.
11. Přímé optické afinitní sensory. Využití exponenciální vlny a resonance povrchových plasmonů ke sledování bioafinitních interakcí v reálné čase. Integrované optické systémy, interferometry a podobné techniky.
12. Imobilizace biomolekul při konstrukci biosenzorů. Membránové techniky. Elektropolymerace.
13. Aktivace povrchu sensorů. Kovalentní vazba biomolekul.
14. Miniaturizace a masová produkce biosenzorů. Sítotisk, litografie, biosensory jako součást integrovaných analytických systémů, biočipy.
15. Komerční biosensory. Perspektivy biosenzorů, oblasti uplatnění v medicíně, potravinářství, ochraně životního prostředí, vojenství.

**Výukové metody:** přednáškový kurz

**Metody hodnocení:** přednášky, ústní zkouška nebo kolokvium

### Literatura:

- Voet, Donald - Voet, Judith G. - Pratt, Charlotte W. *Fundamentals of biochemistry :life at the molecular level*. 3rd ed. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2008. xxx, 1099., ISBN 978-0-470-12930. info

## C9300 Diplomová práce I (BC)

**Vyučující:** [doc. RNDr. Oldřich Janiczek CSc.](#)

**Rozsah:** 0/0/5. 5 kr. Ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Témata vypsána učiteli Ústavu biochemie a Národního centra pro výzkum biomolekul v rozpisech.

### Osnova:

Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

**Výukové metody:** Samostatná práce studentů pod vedením školitele. Studium odborné literatury, experimentální práce v laboratoři, osobní konzultace s vedoucím práce.

**Metody hodnocení:** Zápočet je udělený za úspěšný postup v přípravě práce.

### Literatura:

- Voet, Donald - Voet, Judith G. *Biochemistry*. 3rd ed. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2004. xv, 1591 s. ISBN 0-471-41761-0. info



### C9310 Diplomová práce III (BC)

Vyučující: [doc. RNDr. Oldřich Janiczek CSc.](#)

Rozsah: 0/0/10. 10 kr. Ukončení: kz.

Cíle předmětu: Témata vypsaná učiteli Ústavu biochemie a Národního centra pro výzkum biomolekul v rozpisech.

Osnova:

Individuální konzultace v průběhu zpracování diplomové práce.

**Výukové metody:** Samostatná práce studentů pod vedením školitele. Studium odborné literatury, experimentální práce v laboratoři, osobní konzultace s vedoucím práce.

**Metody hodnocení:** Zápočet je udělený za úspěšný postup v přípravě práce.

**Literatura:**

- Voet, Donald - Voet, Judith G. *Biochemistry*. 3rd ed. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2004. xv, 1591 s. ISBN 0-471-41761-0. info

### C9920 Úvod do kvantové chemie

Vyučující: [Mgr. Markéta Munzarová Dr. rer. nat.](#)

Rozsah: 2/0/0. 2 kr. (příř plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

Cíle předmětu: Charakteristika předmětu: Jedná se o jednosemestrální uvedení do problematiky základů metod kvantové chemie a jejich aplikace na reprodukci, interpretaci a predikci experimentálních dat pro reálné chemické systémy. Kurz je zaměřen na poskytnutí teoretického základu potřebného pro studenty, kteří uvažují o využití metod kvantové chemie ve svých vlastních výzkumných úkolech nebo kteří tak již činí. Využití matematiky je omezeno na nezbytné minimum; základní kvantově-mechanické koncepty jsou zavedeny v rámci přednášky na konkrétních příkladech. Cíle předmětu: Pochopení základních konceptů kvantové mechaniky na jednoduchých reálných chemických systémech; osvojení principů výpočetních metod kvantové chemie; osvojení základních pravidel kvalitativní teorie MO umožňující orientaci ve vypočtených datech a propojení ke konceptům užívaných experimentálními chemiky.

Osnova:

1. Základní koncepty kvantové mechaniky. Historie a současnost kvantové chemie (QCH). 2. Atom vodíku. 3. Atomy s více elektrony. 4. Molekulový ion  $H_2^+$  : Metoda MO-LCAO. 5. Molekuly s více elektrony: Jednoduchá a rozšířená Hueckelova metoda (HMO a EHT). 6. Kvalitativní popis elektronové struktury. Symetrie. Orbitální interakce. 7. Interakční a korelační diagramy malých molekul. 8. "Ab initio" kvantová chemie: Metoda Hartree-Fockova (HF). 9. Nadstavby HF metody: Konfigurační interakce (CI), Poruchová metoda (MP), Metoda spřažených klastrů (CC). 10. Metoda funkcionálu hustoty (DFT). 11. Hierarchie ab initio metod, jejich vztah ke klasické a kvantové molekulové dynamice (MD). 12. Strategie aplikace QM metod na chemické problémy. Cíle předmětu: Pochopení základních konceptů kvantové mechaniky na jednoduchých reálných chemických systémech; osvojení principů výpočetních metod kvantové chemie; osvojení základních pravidel kvalitativní teorie MO umožňující orientaci ve vypočtených datech a propojení ke konceptům užívaných experimentálními chemiky.

**Výukové metody:** Přednášky, diskuse v hodině, konzultace.

**Metody hodnocení:** ústní zkouška.

**Literatura:**

- Lowe, John P. *Quantum chemistry*. 2nd ed. San Diego : Academic Press, 1993. xx, 711 s. ISBN 0-12-457555-2. info
- Levine, Ira N. *Quantum chemistry*. 5th ed. Upper Saddle River : Prentice Hall, 1999. x, 739 s. ISBN 0-13-685512-1. info
- Pilar, Frank L. *Elementary quantum chemistry*. 2nd ed. New York : McGraw-Hill Publishing Company, 1990. xvi, 599 s. ISBN 0-07-050093-2. info
- Koch, Wolfram - Holthausen, Max C. *A chemist's guide to density functional theory*. 2nd ed. Weinheim : Wiley-VCH, 2002. xiii, 300. ISBN 3-527-30422-3. info

### C9930 Metody kvantové chemie

Vyučující: [Mgr. Markéta Munzarová Dr. rer. nat.](#)

**Rozsah:** 2/0/0. 2 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Tento předmět v návaznosti na kurz C9920 doplňuje a prohlubuje základy metod kvantové chemie a dále se zaměřuje na strategie analýzy výsledků kvantově-chemických výpočtů. Důraz je kladen především na různé přístupy k analýze rozložení elektronové hustoty v rámci jedoelektronových přístupů (kanonické MO, NBO). Nově se kurz věnuje i technikám optimalizace geometrie stejně jako strategiím zahrnutí dynamiky a solvatace. Cíle: osvojení základů metod QCH, pochopení postupu při výpočtu konkrétních molekulových vlastností, interpretace výsledků.

**Osnova:**

(1) Postuláty kvantové mechaniky. (2) Poruchové přístupy v kvantové chemii. (3) Metoda spřažených klastrů (CC). (4) Symetrie molekul a její využití v QCH výpočtech. (5) Molekulové vlastnosti: teorie. (6) Molekulové vlastnosti: ilustrace konceptů. (7) Techniky optimalizace geometrie. (8) Simulace a modely solventu. (9) Vlnová funkce: populační analýza - klasické přístupy, model AIM. (10) Přirozené orbitály (NBO) a na nich založená populační analýza. (11) Chemické koncepty v NBO schématu, analýza MO příspěvků k daným vlastnostem, interpretace MO energií a tvarů. (12) Ilustrace na konkrétních výzkumných projektech, shrnutí.

**Výukové metody:** Přednášky vč. diskuse, konzultace.

**Metody hodnocení:** Používané výukové metody: přednášky, diskuse v hodině, prezentace výsledků vlastního výzkumu a diskuse o nich, domácí úkoly, četba z vybrané literatury. Požadavky pro ukončení: Ústní zkouška

**Literatura:**

- *Quantum chemistry*. Edited by Ira N. Levine. 6th ed. Upper Saddle River, N.J. : Prentice Hall, 2009. x, 751 s. ISBN 9780136131069. info
- Lowe, John P. *Quantum chemistry*. 2nd ed. San Diego : Academic Press, 1993. xx, 711 s. ISBN 0-12-457555-2. info
- Pilar, Frank L. *Elementary quantum chemistry*. 2nd ed. New York : McGraw-Hill Publishing Company, 1990. xvi, 599 s. ISBN 0-07-050093-2. info
- Koch, Wolfram - Holthausen, Max C. *A chemist's guide to density functional theory*. 2nd ed. Weinheim : Wiley-VCH, 2002. xiii, 300. ISBN 3-527-30422-3. info

### F5030 Základy kvantové mechaniky

**Vyučující:** [doc. Mgr. Dominik Munzar Dr.](#)

**Rozsah:** 2/2/0. 4 kr. (příf plus uk plus > 4). Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Jde o základní kurz kvantové mechaniky. Hlavní cíle kurzu jsou: zvládnutí základního matematického aparátu používaného v kvantové mechanice; pochopení pojmů amplitudy pravděpodobnosti a vlnové funkce; zvládnutí řešení Schroedingerovy rovnice v jednoduchých situacích (potenciálové jámy, schody a bariéry, harmonický oscilátor, atom vodíku); schopnost aplikovat přibližné metody (poruchová teorie a variační metoda) v nejjednodušších situacích.

**Osnova:**

#### I. Úvodní část

1. Prvky fyziky mikrosvětla: diskrétnost, vlnově-částicový dualismus, neurčitost, komplementarita.
2. Jednočásticová vlnová mechanika: De Broglieho vlny, Schroedingerova rovnice, obecné vlastnosti řešení v jednorozměrném případě, částice v potenciálové jámě, tunelování přes potenciálovou bariéru, zmínka o aplikacích v oblasti polovodičových nanostruktur.
3. Pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce a její Fourierovy transformace, střední hodnoty funkcí závislých na poloze a hybnosti, relace neurčitosti pro polohu a hybnost.
4. Příklady systémů s konečnou dimenzí a náznak jejich kvantověmechanického popisu (částice, pro kterou je dostupných pouze několik diskrétních hladin, spin, polarizační stav světla).

#### II. Formalismus

1. Abstraktní Hilbertův prostor, stavové vektory a jejich reprezentace, lineární operátory a jejich reprezentace, hermiteovské operátory a jejich vlastnosti.
2. Postuláty kvantové mechaniky týkající se popisu stavu systému, fyzikálních veličin a měření; relace neurčitosti v obecném případě, úplné soubory navzájem komutujících operátorů.
3. Časový vývoj: Schroedingerova rovnice v obecném případě, Heisenbergova reprezentace, souvislosti s klasickou fyzikou (Ehrenfestovy věty, klasická limita Schroedingerovy rovnice), stacionární případ.

### III. Aplikace

1. Harmonický oscilátor: řešení problému algebraickou metodou, s využitím kreačních a anihilačních operátorů, energiové spektrum a vlnové funkce, limita velkých kvantových čísel, zmínka o použití v teorii záření černého tělesa a v teorii dynamiky jader.
2. Moment hybnosti v kvantové mechanice: komutační relace pro složky orbitálního momentu hybnosti částice, rozšíření na složky celkového momentu hybnosti libovolného systému, stanovení vlastních hodnot velikosti momentu hybnosti a vybrané složky momentu hybnosti algebraickou metodou, vlastní funkce v případě orbitálního momentu hybnosti, popis spinu elektronu, skládání momentů hybnosti (v náznavu).
3. Centrální pole: zjednodušení problému s využitím rotační symetrie hamiltoniánu, radiální Schroedingerova rovnice a náznak řešení, energiové spektrum a vlnové funkce atomu vodíku.
4. Přibližné metody: stacionární teorie poruch pro nedegenerované energiové hladiny i pro degenerovaný případ, nestacionární teorie poruch, pravděpodobnost přechodu mezi hladinami vlivem poruchy, Fermiho zlaté pravidlo, zmínka o aplikacích v teorii optické odezvy, variační metoda, zmínka o aplikacích v kvantové chemii.
5. Systémy identických částic: postulát o symetrii/antisymetrii vlnových funkcí souboru identických částic vůči výměně částic, bosony a fermiony, vztah mezi symetrií a spinem, Pauliho princip, vlnové funkce souborů neinteragujících částic, zmínka o aplikacích v teorii kondenzovaných látek (základní stav Bose-Einsteinova kondenzátu, Fermiho moře).

**Výukové metody:** Přednášky a řešení příkladů ve cvičení.

**Metody hodnocení:** Kurz je ukončen zkouškou, která má písemnou část (test obsahující zhruba 20 jednoduchých otázek a krátkých příkladů a písemná práce obsahující dvě až tři úlohy) a ústní část. Nutnou podmínkou pro úspěšné absolvování zkoušky je získání alespoň poloviny bodů z testu. Podmínkou přístupu ke zkoušce je aktivní účast na cvičeních a získání alespoň poloviny bodů z průběžně zadávaných písemných prací. V odůvodněných případech stanoví cvičící náhradní formu splnění této podmínky.

#### Literatura:

- Zettili, Nouredine. *Quantum mechanics :concepts and applications*. Chichester : John Wiley & Sons, 2001. xiv, 649 s. ISBN 0-471-48944-1. info
- Formánek, Jiří. *Úvod do kvantové teorie*. Vyd. 2., upr. a rozš. Praha : Academia, 2004. xx, 502, 1. ISBN 80-200-1176-5. info
- Griffiths, David Jeffrey. *Introduction to quantum mechanics*. Englewood Cliffs : Prentice Hall, 1995. 9, 394 s. ISBN 0-13-124405-1. info
- Marx, György. *Úvod do kvantové mechaniky*. 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1965. 294 s. info
- Landau, Lev Davidovič - Lifšic, Jevgenij Michajlovič. *Quantum mechanics :non-relativistic theory*. Edited by J. S. Bell, Translated by J. B. Sykes. 3rd ed., rev. and enl. Amsterdam : Butterworth-Heinemann, 1977. xv, 677 s. ISBN 0-7506-3539-8. info
- Blochincev, D. I. *Základy kvantové mechaniky [Blochincev, 1956]*. 1. vyd. Praha : Nakladatelství Československé akademie věd, 1956. 545 s. info
- Matthews, Paul T. *Základy kvantové mechaniky [Matthews, 1976]*. 1. vyd. Praha : SNTL - Nakladatelství technické literatury, 1976. 256 s. info
- Celý, Jan. *Základy kvantové mechaniky pro chemiky. I, Principy [Celý, 1986]*. 1. vyd. Brno : Rektorát UJEP, 1986. 176 s. info
- Celý, Jan. *Základy kvantové mechaniky pro chemiky. II, Aplikace*. 1. vyd. Brno : Rektorát UJEP, 1983. 161 s. info
- Davydov, Aleksandr Sergejevič. *Kvantová mechanika [Davydov, 1978] : Kvantovaja mechanika (Orig.)*. 1. vyd. Praha : Státní pedagogické nakladatelství, 1978. 685 s. info
- Liboff, Richard L. *Introductory quantum mechanics*. 2nd ed. Reading : Addison-Wesley Publishing Company, 1993. vii, 782 s. ISBN 0-201-54715-5. info
- Pišút, Ján - Gomolčák, Ladislav - Černý, Vladimír. *Úvod do kvantovej mechaniky [Pišút, 1983]*. 2. vyd. Bratislava : Alfa, 1983. 551 s. info
- Landau, Lev Davidovič - Lifšic, Jevgenij Michajlovič. *Úvod do teoretickej fyziky. 2, Kvantová mechanika*. 1. vyd. Bratislava : Alfa, 1982. 357 s. info

#### F5351 Základy molekulární biofyziky

**Vyučující:** [Mgr. Karel Kubiček PhD.](#), [prof. RNDr. Jiří Šponer DrSc.](#)

**Rozsah:** 2/1. 2 kr. (plus ukončení). Ukončení: zk.



**Cíle předmětu:** Tato přednáška zprostředkuje studentům vědomosti o struktuře a funkci biopolymerů. Jelikož vlastnosti biopolymerů jsou úzce spjaty se silami, kterými na sebe působí jejich molekuly, je zvláštní pozornost věnována fyzikální podstatě mezimolekulárních sil. Důraz je kladem na vztah fyzikálních a chemických vlastností biomolekul k jejich struktuře. Pro úspěšné absolvování předmětu musí studenti být schopni - popsat a vysvětlit podstatu mezimolekulárních sil - odvodit ze struktury zadané biomolekuly její základní fyzikální a chemické vlastnosti.

**Osnova:**

- Úvod do molekulární biofyziky
- Mezimolekulární síly
- Nukleové kyseliny
- Proteiny
- Sacharidy
- Lipidy
- Molekulární biofyzika biomembrán
- Fotosyntéza
- Vybrané metaloproteiny: struktura a funkce

**Výukové metody:** Přednášky doprovázené diskusí.

**Metody hodnocení:** Závěrečná ústní zkouška.

**Literatura:**

- Voet, Donald - Voet, Judith G. - Pratt, Charlotte W. *Fundamentals of biochemistry :life at the molecular level*. 3rd ed. Hoboken, N.J. : John Wiley & Sons, 2008. xxx, 1099,. ISBN 978-0-470-12930. info

### **F8310 Molekulové interakce a jejich úloha v biologii a chemii**

**Vyučující:** [prof. RNDr. Jiří Šponer DrSc.](#)

**Rozsah:** 2/0. 3 kr. (plus ukončení). Ukončení: k.

**Cíle předmětu:** Předmětu objasňuje moderní pohled na úlohu molekulových interakcí v chemii a biologii. Bodou vysvětleny základní molekulové interakce (kovalentní struktura, van der Waalsova interakce, elektrostatické interakce, vodíkové vazby, a další možné doplňkové interakce.). Podrobně bude diskutován vliv solvatace a entropie. Bodou vysvětleny základní možnosti jejich popisu, tj. klasická aproximace pomocí empirických potenciálů, a plný kvantově-chemický popis. Budou uvedeny základní experimentální techniky (fyzikálně-chemické metody a rentgenostrukturní analýza) Vše bude rozsáhle ilustrováno na příkladech, zejména se bude jednat o moderní poznatky o struktuře, dynamice a funkci molekul RNA, s rozsáhlou analýzou funkce ribosomu během syntézy bílkovin. Hlavním cílem předmětu je umožnit studentům - popsat a vysvětlit úlohu molekulových interakcí v chemii a biologii (jak v rámci klasické aproximace tak v kvantově-chemického popisu) - popsat a vysvětlit základní vztahující se experimenty a experimentální techniky.

**Osnova:**

- Úloha molekulových interakcí a proč jsou důležité
- Kovalentní struktura
- Van der Waalsovy síly
- Elektrostatické síly
- Vodíkové vazby
- Neaktivita interakcí, indukce a charge transfer
- Empirický potenciál, molekulová mechanika, molekulová dynamika
- Kvantově-chemický popis
- báze atomových orbitalů
- Elektronová korelace
- fyzikálně chemické metody
- rentgenostrukturní analýza
- vliv solventu a entropie
- Supramolekulární systémy v chemii
- Struktura bílkovin
- Struktura DNA

- protein-DNA komplexy
- revoluce v biologii, struktura, dynamika a funkce RNA
- principy molekulových interakcí v RNA
- Struktura a funkce velké ribosomální podjednotky
- Struktura a funkce malé ribosomální podjednotky
- elongační cyklus ribosomu
- úloha molekulových interakcí v voluci ribosomální RNA
- základní principy funkce biomolekulárních strojů a jak se liší od makroskopických strojů

**Výukové metody:** Přednášky s mnoha ilustračními příklady, diskuze, praktické ukázky.

**Metody hodnocení:** diskuze, ústní zkouška na kolokvium.

**Literatura:**

- *Computational studies of RNA and DNA*. Edited by Jiří Šponer - Filip Lankaš. Dordrecht : Springer, 2006. xi, 636 s. ISBN 1-4020-4794-0. info

#### **JA002 Pokročilá odborná angličtina - zkouška**

**Vyučující:** [Mgr. Andrea Rozkošná](#), [PhDr. Hana Němcová](#)

**Rozsah:** 0/0. 2 kr. Ukončení: zk.

**Cíle předmětu:** Zkouška prověří, že student je schopen zvládat následující dovednosti odpovídající úrovni B2 ERR - odborný jazyk porozumět odbornému textu/mluvenému projevu identifikovat hlavní myšlenky formulovat hlavní myšlenky interpretovat informaci z textu/mluveného projevu shrnout náročnější odborný text klasifikovat, porovnávat, určit příčiny a důsledky, popsat proces, definovat prezentovat odborný text vztahující se ke studovanému oboru za použití pokročilých prezentačních technik diskutovat o obecných a odborných tématech hovořit o svém oboru - disponovat základní slovní zásobou svého oboru argumentovat

**Osnova:**

1. Písemná část

a) Akademická část - gramatika odborného textu viz

<http://www.sci.muni.cz/main.php?stranka=Jazyky&podtext=A2>

b) Odborný text - slovník k dispozici (porozumění textu, shrnutí)

2. Ústní část

Prezentace odborného textu vztahujícího se ke studovanému oboru - téma dle vlastního výběru, ale obsah srozumitelný i pro posluchače jiných oborů, v rozsahu 10 minut s využitím veškerých prezentačních technik, popř. názorných pomůcek. Je třeba prokázat i schopnost reagovat na otázky publika.

**Výukové metody:** Zkouška

**Metody hodnocení:** Písemný test, ústní zkouška

**Literatura:**

- Jeremy Comfort. *Effective Presentations*. OUP 2000.
- Douglas Bell. *Passport to Academic Presentations*. Garnet 2008.
- *Academic vocabulary in use*. Edited by Michael McCarthy - Felicity O'Dell. Cambridge : Cambridge University Press, 2008. 176 s. ISBN 978-0-521-68939. info
- Keith Kelly. *Science*. Macmillan 2008
- *Key words in science & technology : helping learners with real English*. Edited by Bill Mascull. 1st ed. London : Harper Collins Publishers, 1997. xii, 210 s. ISBN 0-00-375098-1. info
- *Academic writing course : study skills in English*. Edited by R.R Jordan. 1st ed. Essex : Longman, 1999. 160 s. ISBN 0-582-40019-8. info
- *English for science*. Edited by Fran Zimmerman. New Jersey : Regents/Prentice Hall, 1989
- Donovan, Peter. *Basic English for Science*. 10. vyd. Oxford : University Press, 1994. 153 s. ISBN 0-19-457180-7. info
- *Nucleus ; English for science and technology*. Edited by Martin Bates - Tony Dudley-Evans. info
- *Physics: Reader*. Ivana Tulajová, Masarykova univerzita Přírodovědecká fakulta 2000
- Plummer, Charles C. - McGeary, David. *Physical geology : student study art notebook*. 7th ed. Dubuque : Wm. C. Brown Communications, 1996. 161 s. ISBN 0-697-28732-7. info
- Strahler, Alan H. - Strahler, Arthur Newell. *Introducing physical geography*. 4th ed. Hoboken, N.J. : J. Wiley, 2006. xxv, 728 s. ISBN 0-471-67950-X. info

- Murphy, Raymond. *English grammar in use :a self-study reference and practice book for intermediate students of English : with answers*. 3rd ed. Cambridge : Cambridge University Press, 2004. x, 379 s. ISBN 0-521-53762-2. info
- Cunningham, Sarah - Bowler, Bill. *Headway : intermediate : pronunciation*. 1. vyd. Oxford : Oxford University Press, 1990. xi, 112 s. ISBN -19-433968-8. info
- +Any materials aimed at preparation for B2 level examinations(e.g. FCE, TOEFL)

## **XV004 Výzkum a vývoj v praxi**

**Vyučující:** [RNDr. Eva Janoušková Ph.D.](#)

**Rozsah:** 2/2. 4 kr. (plus ukončení). Ukončení: kz.

**Cíle předmětu:** Předmět je v nabídce od jarního semestru 2008. Vychází ze zkušeností s pořádáním podobně zaměřených kurzů „Uplatnění inovací v podnikatelské praxi“ (jaro 2006), „Vědec - podnikatel“ (jaro 2007) a především stávající aktuální poptávky studentů MU po získání informací a vzdělání v této oblasti. Předmět je určen především studentům magisterských a doktorských studijních programů PřF, LF a FI, nabízen je však napříč celou univerzitou. Hlavním cílem předmětu je vnést do povědomí studentů reálný náhled na řízení, organizaci i finanční zabezpečení vědeckovýzkumné činnosti a poukázat na nezbytné aspekty, které dnešní výzkum obnáší, a to včetně přesahů do jiných oborů a s použitím různých přístupů. Základní tematické okruhy předmětu tvoří: (1.) komplexní řízení a správa projektů, (2.) zdroje financování výzkumu a vývoje (dostupnost, úskalí při získávání, veřejná X soukromá sféra), (3.) ochrana duševního vlastnictví, (4.) nakládání s výstupy výzkumu a vývoje (transfer technologií a znalostí, spolupráce univerzit s podniky, smluvní vztahy), (5.) podnikání v akademickém prostředí (strategie univerzit, vznik spin-off, převedení výzkumného projektu do podoby podnikatelského plánu) a (6.) podnikání v neakademickém prostředí (proč začít podnikat + veškeré informace související s podnikáním). Předmět je koncipován jako interaktivní a má za úkol vybavit posluchače potřebnými znalostmi v netradiční ucelené podobě.

### **Osnova:**

#### 1. Řízení a správa projektů

Praktické poznatky pro všechny řešitele jakýchkoliv projektů, např.: - co je to projekt (pohled univerzity/podnikatele, projekt jako takový/grant, výzkumný záměr aj.) - základní struktura projektu (akademické/neakademické prostředí) - role týmu, řízení lidských zdrojů a týmů - ekonomická hlediska projektu, evidence a administrativní náležitosti - odpovědnost za projekt, efektivita, plnění cílů, nakládání s výstupy.

#### 2. Financování výzkumu

Úvod do problematiky financování vědy a výzkumu na institucích, které je provozují (univerzity, akademie věd, resortní ústavy), zaměřuje se např. na otázky: - proč, za jakých podmínek a v jaké formě financovat výzkum - co a jak financovat (institucionální peníze/konkrétní projekty, veřejné/soukromé zdroje) - dostupnost finančních zdrojů, úskalí v jejich získávání, efektivita při jejich vynakládání - kde a jak v současnosti žádat o finanční prostředky (zdroje ČR, EU a jiné) - rozdíly ve financování základního a aplikovaného výzkumu.

#### 3. Ochrana duševního vlastnictví

Okruh seznamuje s některými aspekty duševního vlastnictví a jeho ochrany, zejména: - co je to duševní vlastnictví - proč a jak duševní vlastnictví chránit - vztah k vědeckovýzkumným výsledkům - nakládání s duševním vlastnictvím - současný přístup a možnosti univerzit v ochraně duševního vlastnictví - základní právní předpisy.

#### 4. Nakládání s výstupy výzkumu a vývoje

Tematický okruh je zaměřen na význam a různé možnosti uplatnění výsledků výzkumu: - současné legislativní podmínky pro uplatnění vědeckovýzkumných výstupů - co je transfer technologií a znalostí a jaké jsou jeho možnosti - role původců a pracovišť v procesu transferu technologií - formy podpory a spolupráce s podniky v celém procesu nakládání s výsledky výzkumu - poskytování výsledků (podmínky, smluvní zajištění vztahů - typové smlouvy aj.).

#### 5. Inovační podnikání v neakademickém prostředí

Tematický okruh seznámí posluchače se základy inovačního podnikání: - než se začne podnikat (proč podnikat, uplatnění nápadů, zhodnocení schopností, cíle) - o čem přemýšlet na začátku podnikání (produkt nebo služba, trh, čas, tým) - faktory prostředí, konkurence, analýza silných a slabých stránek - SWOT - podnikatelský plán (mise, vize, identifikace cílů, definice strategie, kritické faktory úspěchu) kde získat prostředky pro financování podnikání (co zajímá investora, fáze financování, tržní

#### 6. Podnikání v akademickém prostředí

Otázky zahrnující aktuální problematiku, např.: - nová role a strategie univerzit v oblasti akademického podnikání - podnikatelská univerzita - kdo a jak může podnikat - vlastní výzkumný projekt jako podnikatelský záměr - co je to spin-off - možnosti jeho vzniku a význam - inkubátory pro začínající podnikatele.nástroje, banky, podpůrné nástroje - půjčky, fondy, dotační programy EU).

Tematické bloky 5 a 6 spolu souvisejí. Výstupem z těchto bloků bude vytvoření vlastního podnikatelského plánu ve stručné verzi, jeho kontrola a zpětná vazba každému posluchači.

**Výukové metody:** Interaktivní přístup k výuce spočívající v průběžné kombinaci přednášek vysvětlujících principy a podávajících přehled faktů s diskusemi a vlastní prací studentů.

**Metody hodnocení:** Výuka probíhá formou přednášek a navazujících praktických cvičení. Předmět je ukončen klasifikovaným zápočtem, rozhodující pro jeho udělení je aktivní účast na přednáškách a cvičeních, úspěšné absolvování písemného testu a úspěšné hodnocení ústních nebo písemných výstupů požadovaných v rámci výuky.

**Literatura:**

- Rosenau, Milton D. *Řízení projektů*. Vyd. 1. Praha : Computer Press, 2000. xiv, 344 s. ISBN 80-7226-218-1. info
- Švejda, Pavel. *Inovační podnikání*. 1. vyd. Praha : Asociace inovačního podnikání, 2007. 348 s. ISBN 978-80-903153-6-5. info
- Němec, Vladimír. *Projektový management*. 1. vyd. Praha : Grada, 2002. 182 s. ISBN 80-247-0392-0. info
- Svozilová, Alena. *Projektový management*. 1. vyd. Praha : Grada, 2006. 353 s. ISBN 80-247-1501-5. info