

# Státní závěrečná zkouška N-BIC BMCH: Nezbytné základy a příklady testující jejich znalost

## NEZBYTNÉ ZÁKLADY

- Koncentrace hmotnostní a molární, hustota, objem a hmotnost roztoku, vztahy mezi nimi (výpočty).
- Hmotnost, rychlost, zrychlení, hybnost, síla, moment hybnosti, kinetická energie, vztahy mezi nimi, Newtonovy zákony.
- Elektrický náboj, elektrický dipólový moment, elektrostatická interakce, Coulombův zákon, elektrická intenzita, síla působící na náboj v elektrickém poli, potenciální energie náboje v elektrickém poli, elektrický potenciál
- Elektromagnetické vlnění. Rovnice rovinné vlny, vztahy mezi energií, frekvencí, periodou, vlnovou délkou, vlnočtem, vzájemné přepočty, jednotky. Dualismus částice-vlna (fotony, elektrony, neutrony), elastický rozptyl, index lomu, difrakce, mikroskopie. Rozsah frekvencí/vlnových délek používaný ke studiu biomakromolekul: rentgenové záření, ultrafialové/viditelné záření, infračervené záření, radiové vlny. Interakce elektromagnetické vlny s molekulami, absorpce, absorbance, fluorescence.
- Chiralita molekul. Asymetrický uhlík (příklady chirálních molekul bez asymetrického uhlíku a nechirálních molekul s asymetrickým uhlíkem), lineárně a cirkulárně polarizované světlo a jeho interakce s chirálními molekulami, cirkulární dichroismus.
- Magnetický dipólový moment, magnetická indukce, síla působící na pohybující se náboj v magnetickém poli, energie magnetického dipólového momentu v homogenním magnetickém poli, precese magnetického dipólového momentu v homogenním magnetickém poli, vztah mezi momentem hybnosti a magnetickým dipólovým momentem.
- Termodynamická rovnováha, teplota a nultá věta termodynamiky, stavová rovnice ideálního plynu, vnitřní energie, teplo, práce, první věta termodynamiky, entropie, druhá věta termodynamiky, volná energie (Gibbsova, Helmholtzova), vztah mezi volnou energií a rovnovážnými konstantami (zejména disociační), entropie a počet mikrostavů, Boltzmannův zákon.
- Kinetika chemických reakcí, závislost na koncentraci reaktantů, molekularita a řád reakce, diferenciální rovnice popisující kinetiku prvního řádu a její řešení, následné reakce ve stacionárním (ustáleném) stavu, teorie aktivovaného komplexu, aktivační energie, Arrheniův vztah, reakční koordináta, katalýza jako alternativní reakční koordináta s nižší aktivační energií.
- Kovalentní vazba, atomové a molekulové orbitály, polarita a polarizovatelnost vazby, nukleofil a elektrofil, kyselina Bronstedova a Lewisova, výpočet pH roztoku slabé/silné kyseliny/baze, v přítomnosti soli, pufrů.

# PŘÍKLADY

1. Kolik gramů glukosy ( $M_r = 180$ ) je v celé krevní oběhové soustavě diabetika, pokud v jeho těle obíhá pět litrů krve, ve které byla změřena 10mM koncentrace glukosy? [9 g]
2. Kolik gramů glycerolu bude obsahovat jeden gram roztoku, který vznikne smícháním jednoho litru čistého glycerolu (hustota  $1,26 \text{ g cm}^{-3}$ ) a 740 mililitrů vody (hustota  $1,00 \text{ g cm}^{-3}$ )? [0,63 g]
3. Smícháním 80 g methanolu ( $M_r = 34$ ) a 20 g vody ( $M_r = 18$ ) vznikne roztok o hustotě  $0,85 \text{ g cm}^{-3}$ . Jaká je jeho molární koncentrace? [ $20 \text{ mol dm}^{-3}$ ]
4. Při proteomické analýze získal peptid o molekulové hmotnosti 1 200 Da (což odpovídá  $2 \cdot 10^{-24} \text{ kg}$ ) v hmotnostním spektrometru kinetickou energii  $2,5 \cdot 10^{-15} \text{ J}$ . Za jak dlouho proletí trubicí průletového (TOF) detektoru o délce 1,5 m? [ $3 \cdot 10^{-5} \text{ s}$ ]
5. Během MD simulace působila na atom o hmotnosti  $2 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$  po dobu jedné femtosekundy ( $10^{-15} \text{ s}$ ) síla  $10^{-10} \text{ N}$ . O kolik se působením této síly zvýšila rychlost atomu v daném směru? [o  $5 \text{ m s}^{-1}$ ]
6. Optimální vzdálenost dvou atomů kyslíku z pohledu van der Waalsovy interakce je 0,3 nm. Jakou silou by se odpuzovaly ve vakuu dva bodové náboje o velikosti náboje iontu  $\text{O}^{2-}$ , kdyby se ocitly v této vzdálenosti? Hodnota konstanty  $4\pi\epsilon_0$  je  $111 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$ , velikost elementárního náboje  $1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ . [10 nN]
7. Elektrostatická potenciální energie draselného kationtu klesne při průchodu iontovým kanálem dlouhým 5 nm o  $1,5 \cdot 10^{-20} \text{ J}$ . Jak velká elektrostatická síla by na draselný kationt během průchodu kanálem působila, kdyby byl pokles energie lineární? [3 pN]
8. V přístrojích s nejvyšším magnetickým polem používaných v klinické diagnostice pomocí magnetické rezonance je pacient ozařován radiovými vlnami o frekvenci 300 MHz. Jaká je vlnová délka tohoto záření? Rychlost světla je  $3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$ . [1 m]
9. Peptidová vazba absorbuje ultrafialové záření o vlnové délce 220 nm. Jaká je energie jednoho fotonu o této vlnové délce? Rychlost světla je  $3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$  a Planckova konstanta je  $6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ . [ $9 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ ]
10. Disociační konstanta komplexu lektinu s fukosou při  $27^\circ\text{C}$  je  $10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ . Jaká by byla (včetně znaménka) změna standardní Gibbsovy energie vazby fukosy na lektin, kdybychom za standardní podmínky považovali teplotu  $27^\circ\text{C}$  a 1 M koncentrace fukosy, lektinu a jejich komplexu? Hodnota univerzální plynové konstanty vynásobené přirozeným logaritmem deseti je  $19 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ . [ $-17,1 \text{ kJ mol}^{-1}$ ]
11. Na základě dat získaných isothermální titrační kalorimetrií byla pro vazbu ligandu na protein při  $25^\circ\text{C}$  a pH 7 vypočítána změna standardní entalpie  $-25 \text{ kJ mol}^{-1}$  a změna standardní entropie  $+84 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . Jaká je změna standardní Gibbsovy energie tohoto děje? [ $-50 \text{ kJ mol}^{-1}$ ]
12. V buňce je přítomno tolik enzymu, že by při saturaci substrátem přeměnil za sekundu tisíc molekul substrátu. Kolik molekul substrátu přemění za sekundu enzym ve skutečnosti, je-li buněčná koncentrace substrátu  $10 \mu\text{M}$ ? Předpokládejte kinetiku Michelise a Mentenové s Michaelisovou konstantou rovnou  $0,19 \text{ mmol dm}^{-3}$ . [50]

13. Byla změřena rychlost hydrolýzy labilního antibiotika ve vodě při 60 °C. Kvantový výpočet předpovídá, že při teplotě 250 K by byl přirozený logaritmus rychlosti hydrolýzy o deset jednotek nižší. Jakou hodnotu aktivační energie výpočet předpovídá? Univerzální plynová konstanta je  $8,3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ . [83 kJ mol<sup>-1</sup>]
14. Nestabilní metabolit se za podmínek měření rozpadá reakcí prvního řádu s rychlostní konstantou  $0,033 \text{ s}^{-1}$ . Po jedné minutě od zahájení reakce byla naměřena koncentrace metabolitu  $10 \text{ mmol dm}^{-3}$ . Jaká byla koncentrace metabolitu v okamžiku zahájení reakce? Hodnota Eulerova čísla  $e$  je přibližně 2,7. [73 mmol dm<sup>-3</sup>]
15. V buňce o objemu jeden mikrometr krychlový se při redoxním ději uvolnilo 6 tisíc protonů. Na jakou hodnotu by se změnilo pH z původní hodnoty 7, kdyby nebyla cytoplazma pufrována? [5]
16. Hodnota pK kyseliny mléčné je 3,9. Jaké bude pH (s přesností na desetinu jednotky) pufru připraveného smícháním stejných objemů roztoků 0,5 M mléčnanu sodného a 50 mM kyseliny mléčné? [4,9]