**1) Kvantová teorie molekul (KBF/SZZKT)**

**1. Základní pojmy kvantové mechaniky.** Vlnová funkce, operátory fyzikálních veličin. Schroedingerova rovnice, stacionární, nestacionární stavy. Spin elektronu, spinový formalismus. Základní představy kvantové teorie systémů mnoha částic, systémy totožných částic, symetrické, antisymetrické vlnové funkce, úplné vlnové funkce.

**2. Elementární kvantová teorie atomů se dvěma elektrony.** Atom helia, základní a excitované stavy. Parahelium, ortohelium.

**3. Elementární kvantová teorie atomů s více než dvěma elektrony.** Metody řešení, Hartree - Fockova metoda selfkonzistentního pole.

**4. Základní aproximace v teorii chemické vazby.** Bornova – Oppenheimerova aproximace,

adiabatická aproximace. Jaderný podsystém molekuly, separace vibračních a rotačních stavů dvouatomové molekuly.

**5. Jednoelektronová aproximace.** Hartree – Fockovy rovnice pro řešení jednoelektronových

funkcí a jednoelektronových energií. Molekuly jako systémy s uzavřenými slupkami, Fockův

operátor.

**6. Aproximace n-elektronové funkce molekuly.** Metoda VB, metoda MO LCAO. Volba báze atomových orbitalů v metodě MO LCAO, radiální části vlnových funkcí pro vodíkupodobný atom, Slaterovy a Gaussovy funkce, jejich vlastnosti. Korelační problém, metoda konfigurační interakce CI.

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

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

**9. Kovalentní vazba v heteronukleárních dvouatomových molekulách.** Kovalentní a iontová vazba. Víceatomové molekuly. Hybridizace v teorii chemické vazby, lokalizované a nelokalizované molekulové orbitaly víceatomových molekul.

**10. Přehled výpočetních metod v kvantové teorii chemické vazby.** Metody „ab initio“, semiempirické a empirické metody, příklady těchto metod. Metody uvažující valenční elektrony, π - elektronové přiblížení.

**2) Experimentální metody biofyziky (KBF/SZZEM)**

**1. Klasická teorie interakce optického záření a hmoty.** Maxwellův model, index lomu a index absorpce. Fresnelovy vzorce. Zobecnění pro optické frekvence. Funkce odezvy. Základy dielektrické spektroskopie. Cauchyho vzorec pro analytickou funkci. Obecné Kramers-Kronigovy relace. Relaxace a rezonance. Lorentz-Drudeův model interakce – síla oscilátoru. Einsteinovy koeficienty.

**2.** **Kvantově mechanická teorie spektroskopií.** Obecná vlnová funkce pro pohyb molekul, rozdělení spektroskopií. Fermiho zlaté pravidlo. Teorie rotačních spekter molekul. Klasická a kvantová teorie malých vibrací, normální vibrace. Výběrová pravidla pro vibrační a elektronově-vibrační absorpční spektra. Franck–Condonův princip v absorpci a luminiscenci. Stokesův posuv. Molekulové orbitaly a jejich projev ve spektrech.

**3. Vybrané spektroskopie a metodické otázky.** Fotoakustická spektroskopie. Podstata disperzních a FT metod (FTIR). Reálná spektra, přístrojová funkce. Tvar a podstata absorpčních a luminiscenčních pásů, Špolského spektra, site-selection a hole-burning spektroskopie. Autokorelační funkce ve spektroskopiích rozptylů a fluorescence (FCS). Kvazielastický a Ramanův rozptyl světla (základ teorie).

**4. Teoretická podstata magnetických rezonančních spektroskopií.** Princip magnetické rezonance. Klasický a kvantový popis. Larmorova precese. Blochovy rovnice a jejich stacionární řešení. Absorpční a disperzní signál. Relaxační doby T1 a T2 . Modulační metoda a detekce na postranním pásmu. Tenzor hyperjemné interakce v teorii EPR.

 **5. Teorie symetrie a její použití ve spektroskopiích**. Grupy, třídy konjugovaných prvků, zobrazení grup. Grupy symetrie. Lineární reprezentace grup. Reducibilní a ireducibilní reprezentace grup symetrie, značení ireducibilních reprezentací. Charakter reprezentace a jeho význam, věty o charakteru. Obecné výběrové pravidlo podle symetrie, polarizace přechodu. Příklady použití symetrie ve spektroskopiích.

**6. Nukleární magnetická rezonance (NMR)**. Teorie NMR, klasická, kvantová a fenomenologická, stacionární, časově-proměnné a pulzní magnetické pole. Spektra NMR, počet, intenzita signálů, poloha signálů (stínění jader elektrony, chemický posun) a štěpení čar (nepřímá spin-spinová interakce, spin-spinová interakční konstanta, počet čar v multipletu).

**7. Metody NMR.** Jednorozměrná NMR. 1H-NMR (dipolární interakce), 13C-NMR (širokopásmový dekaplink, off-rezonanční metoda, spinové echo, přenos polarizace) vícerozměrná NMR, homonukleární (J-resolved, nepřímá korelace, dipolární korelace**)** a heteronukleární (J-resolved, nepřímá korelace, inverzní detekce), NMR zobrazování. Experimentální uspořádání NMR spektrometru (kontinuální a pulzní). Použití NMR v biologii a medicíně.

**8. Elektronová paramagnetická rezonance (EPR).** Teorie EPR, rozštěpení energetických hladin, podmínka EPR rezonance, volné radikály, přechodné kovy, spin-orbitální a spin-spinové interakce, přehled interakcí měřených pomocí EPR, porovnání EPR a NMR. Spektra EPR, počet píků, intenzita píku, poloha píku (g-faktor, anizotropie) a štěpení čar (spin-spinová interakce, konstanta hyperjemného štěpení, počet čar v multipletu).

**9. Metody EPR.** Kontinuální EPR (high-field EPR, EPR spin-trapping, EPR labeling, cw ENDOR/ELDOR), pulzní EPR (FT-EPR, pulzní ENDOR/ELDOR, ESEEM), porovnání cw/pulzní ENDOR a ESEEM, EPR zobrazování. Experimentální uspořádání (magnet, klystron, rezonátor), kryogenní technika, Použití EPR v biologii a medicíně.

**10. Mössbauerova spektroskopie.** Teorie Mössbauerova jevu, klasická teorie Mössbauerova jevu, emise a absorpce záření gama volným a vázaným jádrem. Mössbauerova spektra, hyperjemná interakce (monopolní, kvadrupólová, magnetická dipólová), kvalitativní a kvantitativní analýza. Metody Mössbauerovy spektroskopie. Experimentální uspořádání Mössbauerova spektrometru, základní části MS spektrometru, zdroj gama-záření, detektor (scintilační, proporcionální plynové). Použití Mössbauerovy spektroskopie v biologii.

**3) Molekulární biofyzika (KBF/SZZMB)**

**1. Nukleové kyseliny.** Struktura DNA a RNA (složky, primární a sekundární struktura, kanonické konformace). Neobvyklé struktury a vyšší organizace DNA. Enzymy ovlivňující vlastnosti DNA. Chromosomy, nukleosomy a chromatin. Typy RNA a jejich struktury, viroidy a virusoidy, ribozymy, interference pomocí RNA (RNAi). Fyzikální vlastnosti DNA a RNA (síly stabilizující struktury nukleových kyselin, vliv fyzikálních faktorů na strukturu a stabilitu).

**2. Bílkoviny a ostatní biopolymery.** Struktura bílkovin (primární struktura, konformace peptidové vazby, typy a vlastnosti aminokyselin a struktury vyšších řádů). Klasifikace proteinů podle biologické funkce, typy proteinů a jejich funkce, šaperony. Struktura monosacharidů (anomery, α- a β- izomery, konformace pyranos a furanos), optická aktivita sacharidů. Struktura a funkce polysacharidů, konformace glykosidické vazby. Odlišné fyzikální vlastnosti olejů a tuků (vliv dvojných vazeb na strukturu).

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

**4. Hormony a imunitní systém.** Mechanismus působení hormonů. Funkce imunitního systému. Antigeny a protilátky. Imunitní odpověď. Imunologické metody (imunoelektroforéza, elektroimunodifúze, vazebné testy-RIA, ELISA).

**5. Detekce světla rostlinami.** Struktura a funkce fytochromu. Aktivní a neaktivní forma fytochromu a jejich spektra. Fotomorfogeneze. Fotoperiodismus. Kryptochrom, fototropin a jeho funkce.

**6. Buněčné dýchání a fosforylace.** Mitochondrie a Krebsův cyklus. Substrátová, oxidativní a fotosyntetická fosforylace. Chemiosmotická hypotéza. Přenos elektronů v tylakoidních membránách a vnitřních membránách mitochondrií, redoxní schéma.

**7. Svaly a cytoskelet.** Druhy a struktura svalů a svalové buňky. Molekulární mechanismus svalové kontrakce. Biomechanika. Struktura a funkce cytoskeletu. Mikrotubuly, mikrofilamenta, intermediární filamenta. Membránový a jaderný skelet. Kinesiny a dyneiny –molekulární motory.

**8. Smyslové orgány.** Princip detekce světla a zvuku. Struktura oka a ucha. Zrakové buňky a rhodopsin. Cochlea a Cortiho organ a vnitřní a vnější vlasové buňky. Mechanismus funkce hmatu, čichu a chuti. Paciniho tělíska. Chuťové pohárky.

**9. Bioelektrické jevy buňky.** Akční potenciál, jeho popis, refrakterní fáze, Hodgkin-Huxleyova teorie. Klidový membránový potenciál a jeho modely. Struktura a funkce iontových kanálů řízených napětím a ligandem. Elektrické vlastnosti rostlin.

**10. Nervová buňka a funkční anatomie srdce**. Princip šíření nervového a srdečního vzruchu. Struktura neuronů a jejich rozdělení. Synapse, cyklus synaptických váčků, G protein a jeho cyklus. Převodní soustava srdce, pacemakerový potenciál. Akční potenciál nervových buněk a srdečního svalu. Princip EPP, MEPP, EPSP, IPSP a EKG.

**4A) Lékařská biofyzika (KBF/SZZL)**

**1. Pojem biosignálu a jeho úloha v diagnosticko-informačním systému**. Vysvětlení pojmů vlastní a nevlastní biosignály a uvedení příkladů

**2. Zesilovače biopotenciálů, snímací elektrody**. Vznik, snímání a diagnostické využití biopotenciálů (EKG, EMG, EEG).

**3. Rentgenové diagnostické metody** (skiaskopie, skiagrafie), Výpočetní tomografie (CT). Fyzikální základy metody CT, uvedení principu snímání a vznik tomografického obrazu v CT. Pojem CT číslo.

**4. Ultrazvuková diagnostika**. Fyzikální základy sonografie (uzv. měniče, vliv tkání na šíření uzv. mechanické vlny. Režimy zobrazení, Dopplerovské metody měření rychlosti toku krve.

**5. Léčba ionizujícím zářením - nukleární medicína**, radioterapie, scintigrafie, Leksellův gama nůž.

**6. Lasery a jejich klinické využití**. Fyzikální základy laseru. Interakce laserového záření a tkáně. Bezpečnost při aplikacích laserů.

**7. Struktura monomerních složek nukleových kyselin**. Báze, tautomerie bází, ionizace bází, donorové a akceptorové skupiny vodíkových vazeb bází, posttranskripčně kovalentní modifikace bází. Konformace anti a syn, C3'-endo C2'- endo, torsní úhly δ a χ nukleosidů a nukleotidů, konvence číslování atomů v nukleotidech.

**8. Primární a sekundární struktura DNA.** Definice primární a sekundární struktury DNA, Watson-Crickovy a neobvyklé vodíkové vazby, konce řetězců DNA 5' a 3', malý a velký žlábek, roll, slide, tilt, shift, twist, rise, propeller twist. Vlastnosti kanonických forem DNA: A-, B-a Z-DNA.

**9. Kruhová DNA**. Topologie molekul DNA, nadšroubovicové vinutí, topologická parametry, hustota a volná energie nadšroubovicového vinutí.

**10. Stabilita dvojité šroubovice DNA.** Faktory ovlivňující stabilitu dvoušroubovice DNA, denaturace DNA, měření stability dvojité šroubovice DNA, hypochromní a hyperchromní efekt.

**11. Neobvyklé struktury DNA.** Triplexy, kvadruplexy (telomery), palindromy, vlásenky, trojcestné a čtyřcestné rozhraní (křížové struktury), výdutě v DNA (DNA bulges). Ohnutá DNA, persistentní délka.

**12. Enzymy ovlivňující vlastnosti DNA**. Endonuklázy, exonukleázy, restrikční endinukleázy, DNA ligázy, topoisomerázy, telomeráza. Aptamery a jejich uplatnění v medicíně a dalších biomedicínských oborech.

**13. Vliv fyzikálních faktorů na strukturu a stabilitu DNA.** Vliv ionizujícího a neionizujícího záření, ultrazvuku, elektrického pole, teploty.

**14. Struktura a vlastnosti chromatinu**. Struktura prokaryontního a eukaryontního genomu. Heterochromatin, euchromatin. Organizace chromozomů, nukleozomy, histony a nehistonové proteiny. Mitochondriální genom.

**15. Molekulární evoluce a "svět RNA"**. Typy RNA a struktura, transkripce a translace. Viroidy a virusoidy. Katalytická aktivita nukleových kyselin - ribozymy a deoxyribozymy. Interference pomocí RNA (RNAi). Molekulární evoluce a "svět RNA".

**4B) Biofyzika rostlin (KBF/SZZR)**

**1. Voda v rostlině.** Význam vody pro rostliny. Vodní potenciál a jeho složky. Měření vodního potenciálu – psychrometrická metoda a tlakové metody. Stanovení obsahu vody ze spekter odrazivosti. Transpirace a způsoby stanovení její rychlosti.

**2. Fotosynteticky aktivní záření.** Zdroje, spektra, jednotky, měření. Fotosynteticky aktivní záření v porostu, index listové plochy.

**3. Rostlinné pigmenty.** Vlastnosti a funkce pigmentů v rostlinách. Analytické a nedestruktivní stanovení obsahu rostlinných pigmentů. Vliv pohybu chloroplastů na stanovení obsahu chlorofylů. Optické indexy používané ve fyziologii rostlin. „Remote-sensing“.

**4. Struktura fotosyntetického aparátu vyšších rostlin.** List, chloroplasty, tylakoidní membrány, pigment-proteinové komplexy – metody izolace a studia.

**5. Primární (světelné) reakce fotosyntézy.** Vývin kyslíku. Fluorescence chlorofylu – definice, vlastnosti, metody, přístroje, měření, parametry používané ve fyziologii rostlin a jejich změny vyvolané stresem rostlin. Fenotyping.

**6. Sekundární (temnotní) reakce fotosyntézy.** Průduchy – stanovení jejich počtu, otevřenosti a vodivosti. Gazometrické stanovení rychlosti asimilace CO2 a transpirace – princip, systémy, parametry. Závislost rychlosti asimilace CO2 na vnějších faktorech (fotosynteticky aktivní záření, koncentrace CO2, teplota).

**7. Vliv UV-záření na rostliny.** Vliv UV-záření na nukleové kyseliny, proteiny a lipidy. Vliv UV-záření na fotosyntézu. Příznaky poškození rostlin UV-zářením. Mechanismy aklimace/adaptace rostlin na UV-záření.

**8. Architektura rostlin a listů. Modulární stavba rostlin.** Adaptace rostlin k životu na souši. Modulární stavba a koordinovaný růst rostlin. Vrcholové meristémy. Regenerační schopnosti a polarita. Vznik a růst zelených listů. Postavení listů na stonku. Zlatý řez. Koakce a kompetice. Morfologické znaky listů. Struktura monofaciálního, bifaciálního listu a jehnice. Morfologie: mechorosty, lišejníky, trávy. Makrofenologická stupnice obilnin.

**9. Efekty klasické optiky v listu.** Stonek jako válcová čočka. Geometrická optika pokožkové buňky. Fokusace světla v pletivu listu. Stanovení spojných parametrů. Porovnání rostlin rostoucích ve stínu a na slunci. Světlovodné efekty v rostlinách. Koleoptile jednoděložných rostlin, sklereidy. Vliv kapiček vody na povrchu listu.

**10. Odrazivost světla na listu.** Povrch listu, kutikula, trichomy. Interferenční jevy a rozptyly na povrchu listu. Fresnelovy vzorce v obecném tvaru. Obecné znaky spektra odrazivosti listu. Teoretické započtení vnitřní odrazivosti, rozptylu a filtru. Modrý posuv reflektance listů. Rozdíl mezi adaxiální a abaxiální stranou. Měření odrazivosti listu. Vliv obsahu vody v listu na odrazivost. Vegetační indexy odvozené ze spektra odrazivosti.

**11. Absorpční spektrum listu.** Rozdíl mezi absorbancí a absorptancí a měření těchto veličin. Zkreslující efekty: prodlužování dráhy paprsku a efekt síta. Modelové stanovení efektu síta a prodloužení dráhy paprsku. Autentická absorpční spektra listu. Nelinearita absorbance listu a její stanovení.

**12. Profil světla v listu.** Multivrstvové modely a Terashimův vzorec. Tvar světelné křivky fotosyntézy z optického hlediska. Kubelkova-Munkova teorie. Vztah mezi koeficienty rozptylu a absorpce. Světelné křivky vývoje kyslíku. Měření tloušťky vrstev listu interferometricky. Metoda vláknové optiky. Funkční význam palisádového pletiva. Vliv fluorescence chlorofylu na propustnost a odrazivost listu.

**13. Reabsorpce fluorescence chlorofylu.** Teoretická formulace obecně. Experimentální podklady. Závislost poměru pásů na koncentraci pigmentů, vlnové délce buzení a geometrii měření. Homogenní a heterogenní modely. Korekce spekter. Heterogenní model na úrovni jednoho chloroplastu. Vliv přenosu energie na reabsorpci. Zkreslení spekter excitace fluorescence. Sekundární fluorescence. Modrozelená fluorescence listů.

**14. List jako aktivní optický prvek.** Pohyb listu vlivem světla, heliotropismus. Orientace listu vůči dopadajícímu paprsku. Pohyb chloroplastů v buňce. Vliv uspořádání chloroplastů na optické vlastnosti listu a na údaj chlorofylmetru. Reakce pohybu chloroplastů na stresy rostliny. Reakce rostlin na změny světelných podmínek.

**15. Fraktální geometrie rostlin.** Obecná definice fraktálů, fraktální dimenze. Fraktální modely (Kochova křivka, fraktální prach, pěna, houba). Model porostu založený na fraktálech. Fraktální geometrie kořenového systému rostlin. Obecnější příklady použití fraktálů v biologii a medicíně (např. diferenciace neuronů).