

Biologický korespondenční seminář



Biozvěst

Ročník 10

Série 3 – řešení

Milé řešitelky, milí řešitelé,

doufáme, že jste si řešení úloh třetí série desátého ročníku užili a dozvěděli jste se při něm spoustu zajímavých informací, na následujících stránkách naleznete přiložená autorská řešení.

Přejeme příjemné čtení!
autoři Biozvěsta

Úloha 1: Imunitní paměť

Autor: David Machač

Počet bodů: 13

Paměť je svým způsobem používána mnohem delší dobu imunitním systémem nežli nervovou soustavou. Na první pohled je to zvláštní způsob paměti. Avšak i zde existuje organizér informací podobně jako talamus v mozku a stejně tak jistá dlouhodobá a krátkodobá paměť, avšak na naprosto odlišných časových úrovních. Vzájemná komunikace a vyladění těchto mechanismů vede k adekvátním imunitním reakcím jen v případě, že jich je opravdu za potřebí. Zároveň důkladné pochopení „logiky“ naší imunity je klíčové v případě imunoterapií a imunomodulací jako například v případě vývoje a používání vakcín. Bohužel nedávná doba ukázala, že i mezi mnoha tzv. odborníky je jen málo těch, kteří toto nastavení imunitního systému přijímají a chápu. V rámci této úlohy si proto zkusíme alespoň rámcově ukázat, jak imunitní systém přemýšlí.

1. První otázkou je, co to vlastně ta protilátka je? Z čeho a jakým mechanismem protilátka vzniká?

Rozpustný BCR bez transmembránové domény, která by jej vázala v membráně. Vzniká postranskripčním sestřihem RNA pro BCR.

*celkem 1,5 bodu
za definování protilátky 0,5 bodu
za upřesnění z čeho vzniká 0,5 bodu
za jmenování mechanismu vzniku 0,5 bodu*

2. Jaké antigeny rozpoznává TCR a jaké BCR? Jaký je mezi nimi rozdíl? Zaměřte se spíše na strukturu.

TCR rozpoznává sekvence peptidů (pouze peptidy v případě $\alpha\beta$ TCR). BCR rozpoznává trojrozměrné struktury.

*celkem 1,5 bodu
za jmenování, jaké antigeny rozpoznává TCR 0,5 bodu
za jmenování, jaké antigeny rozpoznává BCR 0,5 bodu
za jmenování rozdílu mezi nimi 0,5 bodu*

3. Na jakých molekulách jsou antigeny prezentovány receptorům TCR? Jak jsou T lymfocyty předurčeny k rozpoznání cizích antigenů získaných fagocytózou, nebo nitrobněčných svých i cizích (virové infekce) získaných autofagií (nápopověď: Je zde souvislost s nemocí AIDS vyvolanou lentivirem HIV)?

MHCI, MHCII. MHCI rozpoznává koreceptor CD8 a MHCII koreceptor CD4.

*celkem 2 body
za jmenování molekul 1 bod
za určení předurčení k rozpoznání cizích antigenů 1 bod*

4. Seřad'te následující vakcíny proti SARS-CoV-2 od nejméně účinné po nejúčinnější podle toho co už víte o vzájemné interakci vrozené a adaptivní imunity. Svá rozhodnutí zdůvodněte.

Sputnik V (Gamalejův institut (Rusko)) Přítomnost S proteinu (vzniká z DNA) spolu s adenovirovým vektorem. Vrozená imunita je zde teoreticky lépe stimulována přítomností virových částic.

Comirnaty (Pfizer-BioNTech (USA, Německo)) Přítomnost pouze S proteinu (vzniká z mRNA). Vrozená imunita není schopna u všech lidí rozeznat S protein jako PAMP a efektivně zahájit imunitní odpověď.

CoronaVac (Sinovac Biontech (Čína)) Atenuovaná vakcína obsahující neinfekční virové částice. Imunitní systém má přístup ke kompletní paletě antigenů a zároveň jsou přítomny přirozené PAMPs pro stimulaci vrozené imunity.

Nuvaxovid (Novavax (USA)) Protein spolu s adjuvans. Adjuvans pomáhá kontrolovaně stimulovat vrozenou imunitu.

*celkem 4 body
za každé správné seřazení a zdůvodnění 1 bod*

5. Kdybyste měli podpořit vývoj vakcíny proti SARS-CoV-2, jejíž design by měl teoreticky potenciál chránit očkovaného celoživotně, která z nabídky v předešlé otázce by to byla a proč? Jak byste ji sami vylepšili?

Nuvaxovid, CoronaVac. Velmi variabilní rozhodnutí, bude posuzována individuálně dle komplexnosti odpovědi.

celkem max. 4 body

za jmenování vakcíny společně s odůvodněním 2 body
za myšlenku týkající se vylepšení až 2 body

Úloha 2: Můj dům, můj hrad

Autor: Kateřina Kubíková

Počet bodů: 18

Každý organismus musí den co den čelit celé škále nástrah a nepřízní abiotického i biotického původu. Proti nim se řada živočichů chrání využitím nejrůznějších typů úkrytů. V bezpečí domova ale nelze strávit celý život a dříve či později vás okolnosti stejně donutí své útočiště alespoň na čas opustit a obstarat si třeba večeři nebo partnera. Tedy – pokud si neopatříte obydlí, které si můžete nosit všude s sebou. Notoricky známou skupinou, která se vydala touto cestou, jsou plži se svými ulitami. A právě na jejich schránky se v této úloze zaměříme, přičemž svůj záběr zúžíme jen na suchozemské druhy. A i když ulitu hlemýžďe nebo páskovky zná snad každý a nemusí mu na ní připadat nic výjimečného či zajímavého, pokusíme se vám ukázat, jakou neuvěřitelnou rozmanitostí tvarů a funkcí mohou plži schránky oplývat. Zkrátka, že schránky plžů jsou všechno, jen ne nudné!

1. Nejprve se krátce podíváme na obecnou stavbu schránky měkkýšů. Ta se na příčném průřezu skládá až ze tří základních vrstev odlišného složení.

a. Uveď, které tři vrstvy mohou schránku měkkýšů tvořit.

Povrchovou vrstvu nazýváme **periostrakum**. Jedná se o organickou vrstvu tvořenou především konchiolinem, která dodává schránce její zbarvení a zároveň chrání anorganické vrstvy před působením kyselého prostředí. Pod periostrakem se nachází **ostrakum** a **hypostrakum** tvořené uhličitánem vápenatým v různé krystalické podobě. Perleťová vrstva (hypostrakum) je však u schránek suchozemských plžů obvykle silně redukována, či zcela chybí.

1 bod

b. Bioslav si chtěl ověřit chemické složení schránky jednoduchým pokusem – ponořil střep čerstvé plži ulity na několik hodin do kuchyňského octa. Co se stalo s jednotlivými vrstvami schránky a proč?

Rozpustí se vrstvy tvořené uhličitánem vápenatým, naopak periostrakum, jehož hlavní složkou je konchiolin, se nerozpustí.

1,5 bodu

za odpověď „schránka se rozpustí“ apod. bez zmínky o periostraku 0,5 bodu

2. Spirála, která v typickém případě utváří plži ulitu, totiž může vznikat dvěma různými směry – podle toho pak rozlišujeme schránky levo- a pravotočivé.

a. U následujících obrázků urči, zda jsou na nich schránky levo-, nebo pravotočivé.



A



B



C

Obr. 1: Zástupci středoevropské fauny suchozemských plžů. A. nádolka hrubá (*Vestia gulo*), B. ovsenka (*Chondrina* sp.), C. skalnatka horská (*Faustina cingulella*).

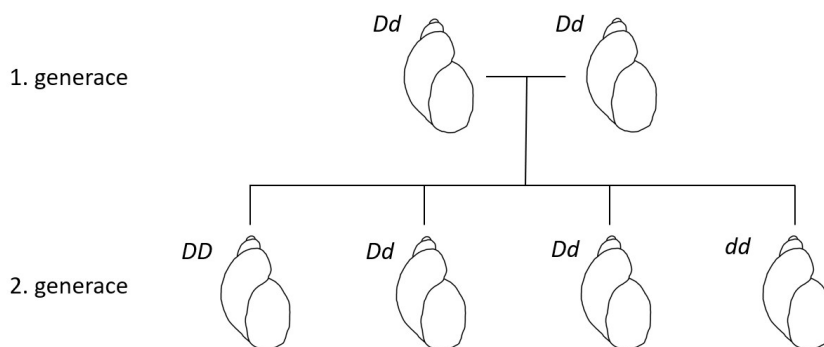
- A. Levotočivá
- B. Pravotočivá
- C. Pravotočivá

celkem 1,5 bodu

za každý obrázek 0,5 bodu

b. Prohlédni si následující rodokmen dvou po sobě jdoucích generací plžů. U každého jedince obrázek znázorňuje jeho točivost a písmenka D/d složení alel příslušného genu daného jedince.

Urči, zda se z vajíček nakladených jedinci druhé generace narodí potomci pravotočiví nebo levotočiví, případně v jakém poměru (uvažuj, že každý ze znázorněných jedinců bude mít stejný počet potomků).



Obr. 2: Rodokmen imaginárního druhu plže se znázorněnou točivostí zobrazených jedinců a jejich genotypem v příslušném genu.

Narodí se pravotočiví i levotočiví potomci v poměru 3:1. Levotočiví potomci se vylíhnou z vajíček nakladených jedincem s genotypem dd, pravotočiví všem jedincům s jinými genotypy.

celkem 1,5 bodu
za správně odvozené točivosti 1 bod
za poměr potomků 0,5 bodu

- c. U naprosté většiny druhů plžů je točivost druhově specifickým znakem a jedinci s opačnou točivostí se objevují jen zcela výjimečně. Pokud už se v populaci objeví, obvykle totiž nepředávají svou genetickou informaci do dalších generací. Čím je to způsobeno?

U většiny druhů znemožňuje asymetrické postavení pohlavního otvoru (u pravotočivých jedinců vpravo, u levotočivých vlevo) páření dvou jedinců opačné točivosti. Neobvykle točivý jedinec, který se v populaci vzácně objeví, tak velmi pravděpodobně nenalezne stejně točivého partnera, se kterým by se mohl spářit.

1 bod

3. Bezobratlí predátoři se mohou přes bariéru v podobě ulity dostat k chutnému plžmu tělíčku v zásadě třemi různými způsoby – vlézt do ulity skrz ústí až k zataženému tělu, rozlouskat ulitu od ústí podél jednotlivých závitů nebo vytvořit otvor ve stěně ulity.

- a. Následující tři obrázky se vztahují k výše zmiňovaným strategiím predátorů plžů. Pokus se co nejpřesněji určit, který predátor si pochutnal (popř. pochutnává) na plžích na jednotlivých obrázcích.



A



B



C



Obr. 3: Schránky s charakteristickými stopami po napadení predátorem. A – vlahovka narudlá (*Monachoides incarnatus*), B – skalnice lepá (*Faustina faustina*), C – sudovka skalní (*Orcula dolium*) a včelínka ozdobná (*Pagodulina pagodula*). Poslední foto: R. Coufal.

- A. Klepítník (*Ischyropsalis* sp.)/střevlík
B. Světluška
C. Dravý plž

celkem 1,5 bodu
za každý obrázek po 0,5 bodu

- b. Nicméně plži si to samozřejmě nenechávají líbit a snaží se nejrůznějšími způsoby tyto tři možné cesty překonání své schránky predátorům co možná nejvíce znesnadnit. Na jejich ulitách se tak setkáváme s celou řadou struktur, které jejich obrannou funkci zefektivňují. Následující struktury na schránkách uvedených druhů roztříd' podle toho, proti jaké predační strategii z minulé otázky jsou zacíleny (některé struktury lze přiřadit k více strategiím, v tom případě ji uved' u té, kde myslíš, že má největší význam).

- A. závorka čeledi Clausiliidae
B. zuby v ústí druhu *Isognomostoma isognomostomos*

C. protažené ústí druhu *Opisthostoma mirabile*

D. mohutný pysk druhu *Otala lactae*

E. operkulum druhu *Pomatias elegans*

F. výrůstky na povrchu ulity druhu *Opisthostoma mirabile*

Proniknutí skrz ústí – závorka čeledi Clausiliidae, operkulum druhu *Pomatias elegans*, zuby v ústí druhu *Isognomostoma isognomostomos*, protažené ústí druhu *Opisthostoma mirabile*

Rozlouskání ulity podél závitů – mohutný pysk druhu *Otala lactae*

Proleptání díry ve stěně schránky – výrůstky na povrchu ulity druhu *Opisthostoma mirabile*

celkem 1,5 bodu

za každou strukturu 0,25 bodu, uznáváno bylo i jiné smysluplné přiřazení

- c. Ovšem abychom mohli o nějaké struktuře na ulitě plže s jistotou prohlásit, že slouží jako antipredační adaptace, je nutné její funkci pokusně ověřit. Vyber si jednu strukturu z předešlé podotázky a navrhní výzkum nebo experiment, který by mohl potvrdit (nebo vyvrátit) její význam v obraně vůči predaci.

Sledovat rozdíl mezi podílem úspěšně zpredovaných juvenilů bez vyvinutého ústí a dospělců s vyvinutými obrannými strukturami v oblasti ústí (pysk, zuby, závorka) téhož druhu, případně experimentální odstranění konkrétní struktury a sledování vlivu na predovanost příslušným typem predátora.

za smysluplné navržení experimentu až 1,5 bodu

4. Některé druhy plžů dovedly své opevnění proti všemožnému biotickému i abiotickému zlu k dokonalosti. Přetvoření ulity v nedobytnou pevnost však s sebou přináší jeden podstatný problém, se kterým se zajímavým způsobem vypořádal druh *Spiraculum travancoricum*, obývající pohoří v západní Indii. O jaký problém se jedná a jakým způsobem si s ním tento druh poradil?

Tento druh má své ústí doslova hermeticky uzavřeno mohutným víčkem, které zabraňuje i přístupu vzduchu k dýchacím orgánům. Proto si tento druh vedle ústí vytvořil jakýsi „šnorchl“ – trubičku umožňující výměnu plynů mezi prostorem uvnitř a vně ulity a zároveň dostatečně tenkou na to, aby byla neprůchozí pro predátory.

celkem 1,5 bodu

za nepřístupnost pro vzduch 1 bod

za uvedení řešení problému 0,5 bodu

5. Dva zástupci jednoho rodu plžů se však rozhodli řídit heslem „Nejlepší obrana je útok!“ a své ulity využívají nejen jako nedobytnou pevnost, ale také jako baseballovou pálku. O které dva druhy žijící ve východní Asii se jedná? Vyhledej si fylogenetický strom tohoto rodu a odvod' z něj, zda schopnost aktivní obrany tyto dva druhy zdědily od společného předka, nebo se u nich vyvinula konvergentně.

Jedná se o druhy *Karaftohelix gainesi* a *K. selskii* a aktivní forma obrany se u nich vyvinula (pravděpodobně) nezávisle na sobě – nejedná se o sesterské druhy a ostatní zástupci tohoto rodu mají pasivní formu obrany (zatažení do schránky).

celkem 1,5 bodu

za uvedení druhů 1 bod

za konvergentní vznik 0,5 bodu

6. U druhu *Libera fratercula* je však ústí pšitěle samo o sobě velmi úzké – tak úzké, že se jím vylíhla mláďata ven neprotáhnou. Jak se tedy dostanou ze svého prenatalního vězení?

Mláďata tohoto druhu se musí po vylíhnutí prokousat ze svého krytu skrze vrchol matčiny schránky. Ta předtím z této oblasti schránky stáhla své tělo, takže „porod“ bez úhony přežije. Tento typ poškození ulity však není schopná zacelit, takže nemůže odchovat další snůšku. Nicméně postreprodukční jedince s takto poškozenou schránkou lze ve volné přírodě potkat a spekuluje se, že se i nadále mohou rozmnožovat v roli samce.

1 bod

7. Jmenuj alespoň tři výhody, které mají tzv. nazi plži (bez ulity) oproti schránkatým druhům.

Větší flexibilita těla – větší nabídka možných úkrytů

Šetření energie potřebné pro stavbu schránky

Nižší potřeba uhličitanu vápenatého – mohou obývat širší škálu habitatů (i kyselé prostředí)

Nižší hmotnost – tedy i vyšší rychlost (tendence k redukci schránky často můžeme pozorovat u dravých druhů plžů) a menší energetický výdej při pohybu

celkem 1,5 bodu

za každou výhodu (uznávány byly i další smysluplné) po 0,5 bodu

8. Jaká struktura je na obrázku (špendlíková hlavička jako velikostní měřítko)? Zástupce které/ých čeledi našich plžů mohl být jejím majitelem?



Obr. 4: Struktura pro otázku 8. Špendlíková hlavička jako velikostní měřítko.

Jedná se o vápenitou destičku, která je rudimentem schránky nahého plže přítomným uvnitř těla v oblasti pod štítem. Rudiment schránky ve formě vápenité destičky mají v naší fauně zástupci čeledi Limacidae, Agriolimacidae a Milacidae (plzáci – čeleď Arionidae má zbytky schránky pouze ve formě drobných vápenitých zrníček). Čeleď Milacidae lze vyloučit, neboť u ní se vyskytuje symetrická destička a podle velikosti lze odvodit, že se nejedná ani o zástupce čeledi Agriolimacidae. Jde tedy o rudiment schránky slimáka (čeleď Limacidae).

celkem 1,5 bodu

za identifikaci objektu 1 bod

za určení (stačilo uvést kteroukoli čeleď z trojice Limacidae, Agriolimacidae a Milacidae) 0,5 bodu

Úloha 3: Krvácení u pacienta se žloutenkou

Autor: Kristýna Minářová

Počet bodů: 13

Na metabolickou jednotku byl přijat 40-ti letý pacient. Při vstupním vyšetření měl sytě **žluté bělmo a kůži** a masivně **zvracel krev**. Byl **dezorientovaný**, zmatený a neklidný, takže validní údaje od něj nebylo možno získat. Odebraná toxikologie byla negativní. Ve vstupní laboratoři byla zjištěna vysoká hodnota **AST s převahou nad ALT** a především extrémně vysoká hodnota **GMT** a **bilirubinu**. Vzhledem k masivnímu krvácení byla zjištěna extrémně **nízká hodnota hemoglobinu**, ale také **nízká hodnota destiček** a vysoká hodnota **INR**, rovněž vysoké hodnoty močoviny a kreatininu. Hodnoty INR se nezlepšily ani po podání velkého množství mražené plasmy, vitamínu K a krevních destiček. Při přijetí byla provedena urgentní gastroscopie, kde byla nalezena **krvácející céva v jícnu**, na kterou byl nasazen klip. Vzhledem k tomu, že extrémně nízká hodnota hemoglobinu nadále přetrvávala i přes podání velkého množství červených krvinek, byla následující den provedena další gastroscopie, nyní s nálezem krvácejícího vředu dvanáctníku. Klipovaný vřed v jícnu byl bez známek krvácení. Proto byl proveden opich krvácejícího vředu a pokračováno v substituci krevními deriváty a infusemi. Ani přes vysokou dávku katecholaminů se nedařilo docílit stabilního krevního tlaku. Neklid pacienta přetrvával, proto byl uveden do umělého spánku a zaintubován. Na umělé plicní ventilaci měl běžný ventilační režim, bez známek plicního selhání. Nicméně pacient přestal močit a **ledvinné parametry se výrazně zhoršily**, proto byla zahájena kontinuální **hemodialýza**. I když v dalším průběhu již k dalšímu krvácení nedošlo, metabolický rozvrat ve smyslu těžké acidósy a selhání ledvin trval nadále, stabilizace krevního oběhu se nedařila a pacient nakonec zemřel.

1. Jaká je základní diagnosa, která vedla ke krvácení, žloutence a nakonec pacienta zabila?

Cirrhosa jater.

1 bod

2. Za normálních okolností jsou cévy kolem jícnu uzavřené, ale při onemocnění, kterým trpěl pacient, dochází k jejich otevření. Jak se tyto cévy označují? Proč došlo ke krvácení?

Jedná se o jícnové varixy. Při jaterní cirrhose dochází ke zvýšení odporu v játrech. Díky tomu krev nemůže protékat přes portální systém v játrech a nachází jiné spojky – mimo jiné i kolem jícnu, říká se jim cavo-cavální anastomózy (spojení horní a dolní duté žíly). Navíc při cirrhose dochází ke snížení syntetické funkce jater, což vede ke snížení produkce všech proteinů, které se v játrech syntetizují – mimo jiné i proteiny koagulační kaskády. Proto má pacient prodloužené INR. A nakonec dochází ke zvýšení aktivity sleziny a spotřebovávání krevních destiček slezinou. Takže vzniká stav, při kterém dochází ke zvýšení tlaku v cévách kolem jícnu a zároveň klesá schopnost srážení krve.

Co se týče následného krvácení z vředu, nejspíše se jednalo o stresový vřed, který vzniká sekundárně, a to i přes kontinuální podávání léků zvyšující pH v žaludku. Jen pro informaci, ve skutečnosti měl tento pacient celkem čtyři gastroscopie,

přičemž krvácel ještě z dalšího vředu v žaludku. Ale to už by bylo moc komplikované, stejně tak nebude nutné pro uznání odpovědi vysvětlovat krvácení z dvanáctníkového vředu.

*celkem 4 body
za jícnové varixy 1 bod
za zdůvodnění krvácení 3 body*

3. Jakým termínem se odborně nazývá zmatenost u pacientů s touto základní diagnosou? Jak vzniká?

Jedná se jaterní encefalopatii. Při cirrhose jater nedochází ke správné metabolizaci látek, protože metabolické dráhy nefungují tak, jak mají. Místo toho vznikají tzv. falešné metabolity, které přestupují přes hematoencefalickou bariéru do mozku a fungují jako falešné neurotransmitery, což ovlivňuje chování. O akutní intoxikaci by se jednat nemělo, protože toxicologie byla negativní, nelze ovšem vyloučit otravu jedy. Dalším možným vysvětlením by bylo delirium tremens, i když není přítomen typický třes.

*celkem 3 body
za jaterní encefalopatii 1 bod
za vysvětlení 2 body*

4. V češtině používáme termín „žloutenka“ poměrně promiskuitně pro dva různé medicínské pojmy – „ikterus“ a „hepatitida“. Jaký je mezi nimi rozdíl?

Ikterus je příznak. Je známkou vysoké hodnoty bilirubinu v krvi a projeví se žlutým zabarvením kůže a bělma. Naproti tomu hepatitida je zánět jater. Může se jednat buď o infekční, nebo neinfekční zánět. Infekční zánět jater je tzv. virová hepatitida. Podle toho, kterým virem je způsobena, je označována písmem- virová hepatitida A,B,C, D a E. V češtině je virová hepatitida A označována jako infekční žloutenka, zatímco virová hepatitida B jako sérová žloutenka. To je dáno historicky tím, že zatímco hepatitida A se přenáší fekálně-orálně (nemoc špinavých rukou) hepatitida B se přenáší krví. Později byla objevena hepatitida C (dříve označována jako non-A, non-B) a nakonec i D a E. Neinfekční hepatitidy jsou autoimunitní onemocnění. Bakteriální infekce jater nejsou označovány jako hepatitidy, protože nedochází k zánětu celých jater. Buď se jedná o abscesy jater (hnisavá ložiska v játrech) nebo o infekce žlučových cest, označované jako cholangitidy. U parazitárních onemocnění hovoříme o cystách.

celkem 2 body

5. Pacient nakonec zemřel na metabolický rozvrat při selhání ledvin.

a. Jak se nazývá syndrom, který vzniká při základním onemocnění pacienta?

Hepatorenální syndrom

1 bod

b. Co dalšího se mohlo podílet na selhání ledvin u pacienta?

Nízký tlak při hemorhagickém šoku jistě vedl k poškození ledvin. Hypoxie, která vznikla při nízkém tlaku, také vedla k poškození ledvin.

Jen uvádím poznámku pod čarou, jak to ve skutečnosti s pacientem bylo, protože skutečnost by byla pro středoškoláky trochu složitá. U pacienta se jedná o dekompenzovanou jaterní cirrhosu s krvácením z jícnových varixů. K této dekompenzaci došlo v důsledku infekce a následně rozvinutého septického šoku. To zhoršilo jeho hepatorenální syndrom a vedlo k metabolickému rozvratu, na který nakonec zemřel. V mezičase ještě opakovaně krvácel z několika streptokokových vředů, které rovněž vedly k jeho destabilizaci. Během hospitalizace dostal celkem 21 transfúzí krve, 10 mražených plasem a 3 náplavy destiček. Měl celkem 4 gastrokopie. Příčinou jaterní cirrhosy byla letitá závislost na alkoholu. To, že přišel bez přítomnosti alkoholu v krvi, jen dokládá, že mu bylo špatně pravděpodobně delší dobu, a proto neužíval alkohol.

2 body

Úloha 4: Potencionální léčiva a drug design

Autor: Anna-Marie Buková

Počet bodů: 20

1. Zkuste vymyslet, kdo všechno se může uplatnit při návrhu nového léku.

Cokoliv, co dává smysl – organický chemik, výpočetní chemik, biochemik, biolog, lékař...

1 bod

2. Jaký je rozdíl mezi účinnou látkou a lékem? Účinná látka se dá také označit zkratkou, která byla přejata z angličtiny, ale běžně se používá. Kterou zkratkou označujeme účinnou látku?

Účinná látka – to, co zajišťuje samotný účinek; lék – konkrétní forma, účinná látka plus další látky, které mohou být zodpovědné např. za rozpustnost atd. Účinná látka se označuje jako API (aktivní farmaceutická ingredience).

1 bod

3. Které parametry to jsou? Co musí látka v případě hodnocení těchto parametrů splňovat?

Jsou to počty donorů a akceptorů vodíkových vazeb, molární hmotnost a rozdělovací koeficient. Počet donorů by neměl být vyšší než 5, počet akceptorů větší než 10, molární hmotnost vyšší než 500 g/mol a rozdělovací koeficient by měl být menší než 5 ($\log P$ = rozdělovací koeficient oktanol/voda, popisuje hydrofobicitu/hydrofilitu dané látky). V praxi mnohé látky parametry nesplňují, např. molární hmotnost některých komerčních léčiv je vyšší, než 500 – záleží hlavně na tom, k čemu je daná látka použita a na tom, jaké je její chování v organismu (u některých látek se cestou do cílového místa části molekuly odštěpí, protože mohou sloužit například jako tzv. targetující skupiny – navedou molekulu na cílovou buňku, pak už nejsou potřeba; příkladů je více, targetující skupiny jsou jen jedna z možností).

2 body

4. Zkuste do tabulky uvést všechny 4 sledované parametry u těchto látek: kyselina acetylsalicylová, nikotin, paracetamol.

Tabulka 1:

	Nikotin	Kyselina acetylsalicylová	Paracetamol
počet donorů	0	1	2
počet akceptorů	2	4	2
M (g/mol)	162	180	151
log P	1,2	1,2	0,5

2 body

5. Splňují uvedené látky podmínky pro potencionální léčiva?

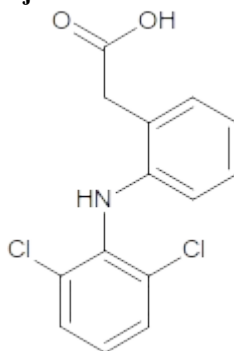
Ano, všechny látky splňují všechny sledované parametry.

0,5 bodu

6. Jak byste Tanimotův podobnostní koeficient definovali? Jakých hodnot může nabývat a čemu odpovídají hraniční hodnoty?

$T = c / a + b + c$; Může nabývat hodnot od 0 (žádná shoda) do 1 (identita).

1 bod

7. Vyjádřete strukturním vzorcem látku s následující SMILES notací: c1ccc(c(c1)CC(=O)O)Nc2c(cccc2Cl)Cl.

1 bod

8. K čemu se používají léky obsahující tuto účinnou látku?

Používají se proti bolesti a při zánětlivých onemocněních.

0,5 bodu

9. Zapište pomocí SMILES notace kyselinu acetylsalicylovou, nikotin a paracetamol.

Kyselina acetylsalicylová → CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O

Nikotin → CN1CCCC1C2=CN=CC=C2

Paracetamol → CC(=O)NC1=CC=C(C=C1)O

celkem 3 body
každá ze struktur 1 bod

10. Porovnejte struktury kyseliny acetylsalicylové, nikotinu a paracetamolu uložené v databázích PubChem a ZINC a uveďte hodnoty RMSD, které porovnáním získáte.

Tabulka 2:

	RMSD
Nikotin	1,419
Kyselina acetylsalicylová	1,241
Paracetamol	-----

Paracetamol je momentálně v databázi ZINC k nalezení v jiné rezonanční struktuře, než na PubChem – rozdíl v rezonanci na amidické vazbě (na PubChem dvojná vazba na kyslík, ZINC má dvojnou vazbu mezi uhlíkem a dusíkem). Z toho důvodu není možné získat RMSD – neshoduje se SMILES notace molekul.

6 bodů

11. Obě struktury následně srovnajte se strukturami dostupnými v Crystallography Open Database. Uveďte, ve které z databází byla struktura bližší realitě.

Struktury bližší realitě jsou v databázi ZINC (porovnání nikotinu a kyseliny acetylsalicylové).

2 body

Úloha 5 (seriálová): Paměť přírody a krajiny

Autor: Veronika Kučminová

Počet bodů: 13

Paměť všeobecně chápeme jako schopnost uchovávat a opětovně si vybavovat informace a zkušenosti z minulosti. Většinou sa tento proces spája so živými organizmami, najmä so živočíchmi na čele s človekom. Definíciu pamäte však môžeme rozšíriť nad hranice jedincov živej bioty. Prvkami pamäte sa totiž vyznačuje celá príroda a krajina. Do pamäte našej Zeme sme načreli už v prvej sérii tohto seriálu cez pohľad paleontológie. V tretej časti mierne nadviážeme a pozrieme sa do nedávnej histórie našej prírody. Preskúmame, čo si krajina v dnešnej dobe pamätá a ako človek tieto „spomienky“ skúma a využíva.

1. Čo presne rozumieme pod pojmom reliéf? Aké dva druhy reliéfu poznáme podľa veľkosti? Pre každý z nich uveďte aspoň dva príklady prvkov, ktoré ho tvoria.

Reliéf predstavuje členitosť zemského povrchu. Makroreliéfom rozumieme diverzitu reliéfu väčšej plochy krajiny, napríklad plošiny či svahy. Pri mikroreliéfe sa jedná o maloplošné poruchy celkového reliéfu krajiny- pukliny, zosuvy vo svahoch, či priesaky, vývratové jamy, kotle, pseudokary plôch.

1 bod

2. Ako sa nazýva ekologický proces, ktorý prebieha počas obnovy bioty?

Jedná sa o sukcesiu- vývoj a zmeny v zložení spoločenstiev v ekosystéme.

1 bod

3. Aké dve vlastnosti musí spĺňať prostredie ideálne pre čo najdlhšie zachovanie peľových zŕn? Uveďte dva príklady ekosystémov, v ktorých sa vďaka týmto vlastnostiam zachováva najviac peľového materiálu.

Sporopolenin je náchylný k oxidácii a k pôsobeniu silných bází, preto sa najlepšie uchováva v kyslom a bezkyslíkatom prostredí. Takéto prostredie a bohaté nálezy peľových fosílií nachádzame v rašeliniskách a v sedimentoch jazier.

spolu 2 body

za charakteristiku prostredia 1 bod

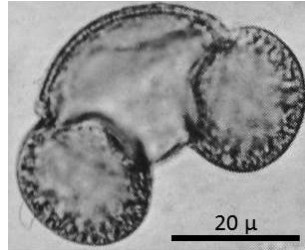
za ekosystémy 1 bod

4. Koľko peľových typov sa vyskytuje na Českom území a koľko z nich pochádza z konca poslednej doby ľadovej?

Na našom území sa vyskytuje približne 700 peľových typov, z konca poslednej doby ľadovej nachádzame 15 až 20 peľových typov.

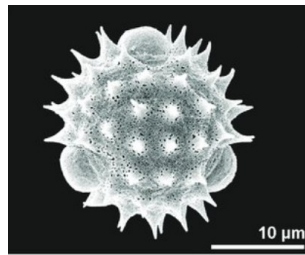
1 bod

5. Pokús sa čo najpresnejšie určiť taxonomickú príslušnosť peľu na obrázku č. 1 a 2. Nezabudni svoje zaradenie aj vysvetliť.



Obr. 5: Peľ borovice. Zdroj: https://www.researchgate.net/publication/335542677_Contribution_to_the_knowledge_of_the_diffusion_of_Pinus_tp_sylvestris_during_lateglacial_in_the_central_Apennines

Jedná sa o peľ borovice lesnej (*Pinus sylvestris*). Body budú pridelené za určenie taxonomickej príslušnosti minimálne do triedy ihličnany (Pinopsida), ktorá sa vyznačuje prítomnosťou vzdušných vakov.



Obr. 6: Peľ sedmokrásky. Zdroj: https://www.researchgate.net/publication/328184896_Pollen_Morphology_and_Ultrastructure/figures?lo=1

Jedná sa o peľ sedmokrásky obyčajnej (*Bellis perennis*) z čeľade astrovité (Asteraceae), s ostnitým povrchom a s 3 kolpovitými otvormi (apertúrami).

Spolu 2 body

Za každé správne určenie a vysvetlenie 1 bod

6. Aké sú nevýhody analýzy peľových sedimentov, ktoré môžu komplikovať rekonštrukciu pôvodnej druhovej skladby na študovanej lokalite (napríklad v porovnaní s makrozvyškami rastlín)? Uveď aspoň 4 nápady.

Peľ sa šíri i na veľkú vzdialenosť a pri štúdiu lokálneho druhového zloženia môžu vzorky obsahovať aj peľ z veľmi vzdialených ekosystémov. Rovnako tak môže ľahko dôjsť aj ku kontaminácii vzoriek. Jednému peľovému typu obvykle odpovedá väčší počet konkrétnych druhov. Druhy, ktoré produkujú málo peľu (najmä hmyzom opelené druhy, s nízkou populačnou hustotou), sú v sedimentoch pomerne vzácne.

spolu najviac 2 body

za každý správny príklad 0,5 bodu

7. Na akých dvoch abiotických vlastnostiach ekosystému najviac závisí druhové zloženie mäkkýšov?

Diverzitu mäkkýšov najviac ovplyvňuje obsah vápniku - uhličitanu vápenatého v substráte a vlhkosť.

1 bod

8. Zamysli sa, ktorá skupina je vhodnejšia pre rekonštrukciu histórie prírody - malé alebo veľké cicavce? Uveď aspoň 4 dôvody, prečo máme o jednej veľkostnej skupine viac hodnotnejších historických informácií.

Viac informácií máme o malých cicavcoch, nakoľko sa vyskytujú vo väčších populačných hustotách, sú krátkožijúce, ich pozostatky sa často akumulujú napríklad v krasových dutinách, kde sovy a dravce koncertujú svoje vývržky. Navyiac, premiestňujú sa na menšie vzdialenosti a majú druhovo špecifické nároky. Preto sú pre štúdium histórie krajiny vhodnejšie.

spolu max. 3 body

za malé cicavce 1 bod

za vlastnosti malých cicavcov max. 2 body

