

Inovace bakalářského studijního oboru Aplikovaná chemie

<http://aplchem.upol.cz>

CZ.1.07/2.2.00/15.0247

Tento projekt je spolufinancován
Evropským sociálním fondem a státním
rozpočtem České republiky.



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost



OKRESNÍ HOSPODÁŘSKÁ
KOMORA OLOMOUČ

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Plakátové sdělení, poster

Garant: Prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.

Vede seminář: Prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.

Cvičící: Mgr. Martin Pykal

Poster

- forma vědeckého sdělení
- formát plakátu
- prezentace – panelové diskuse

Cíle posteru

- přilákat a zaujmout čtenáře
- sdělit komunitě svou myšlenku, představit nové výsledky
- získat kontakty

Formát

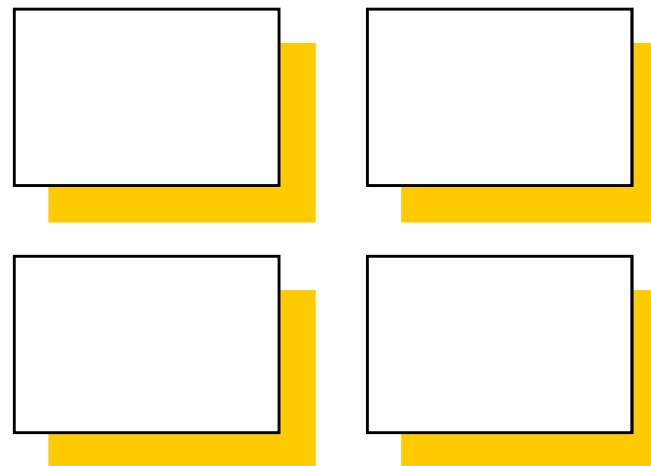
- podřízen
 - cílům
 - technickým požadavkům
 - velikost, podklad (lepit, špendlit...)
 - možnostem
 - finance, tisk, laminace, apod.

Formát

- Zaujmut
– nezapadnout v šedi ostatních (nepřehnat to!)
 - poutavé barvy, zajímavá grafika
- výstižný, stručný popř. poutavý název
- čitelný text
- bohatý obrazový materiál (málo textu)
- pozor, některé instituce mají vlastní grafický manuál – jednotná forma posterů (jednoznačná identifikace instituce)

Velikost

- velikost (A1, A0 ...)
- možnost skládání A4 (levné) – lze využít jako grafický prvek



orientační ceny:

barevná A1 ... 350 Kč

černobílá A1 .. 100 Kč

barevná A0 ... 700 Kč

Velikost písma

- dobře čitelný nadpis z cca 3-4 metrů
 - okolo 40 pt. (72 pt. = 1 inch)
 - lépe bezpatkový, strohý font
- dobře čitelný a přehledný text
 - větší písmo 18-22 pt. (čtení z cca 0.5 m)
 - šetřit textem, velké textové bloky nezaujmu

Obsah

- nadpis
- autoři + instituce
- identifikace prezentujícího autora
- logo instituce (je-li k dispozici)
- úvod = proč
- výsledky = co
- závěr
- poděkování

Můj první poster

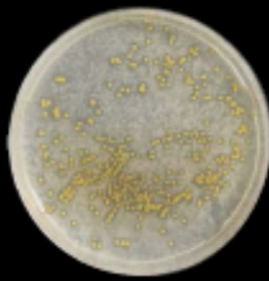
Josef Vocásek^a, Jitka Májová^b

^aKatedra výzkumu, Ústav na Zemi, Opičín, ČR, vocasek@nikde.cz

^bJaderný a technický institut, Upínov, ČR, jitus@jti.cz

Obsah

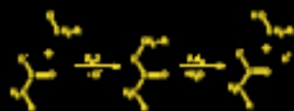
- úvod – stručné vysvětlení motivace, určení cílů
- výsledky – uvádět přehledně: grafy a tabulky s rozšířenými komentáři
- metody – uvádět velmi stručně, standardní jen zmínit (např. stanoveno UV/VIS)
- závěr – stručný, jasné sdělení
- literatura – nemusí být, popř. zásadní
- poděkování – finanční i jiné zdroje



Kulturní kultura *Xanthobacter autotrophicus*



3D struktura haloalkan dehalogenazy



hydrolytická dehalogenace katalyzovaná haloalkan dehalogenazou

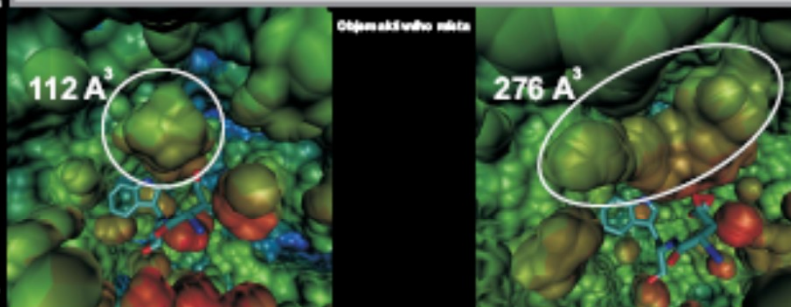
Srovnání průběhu nekatalyzované S_N2 reakce acetátového iontu s 1,2-dichlorethanem a 1,2-dibromethanem s reakcí katalyzovanou enzymem haloalkan dehalogenázou



Eva Otyepková¹, Michal Otyepka¹, Zbyněk Prokop², Michal Boháč², Petr Jeřábek¹, Tatjana Nevěčná¹ and JRGamborák¹



¹Katedra fyzikální chemie, Palackého Univerzity, El. Štepaňovy 26, 771 46 Olomouc, ČR
²Chemická laborator, Masarykova Univerzita, Kotlářská 2, 601 37 Brno, ČR



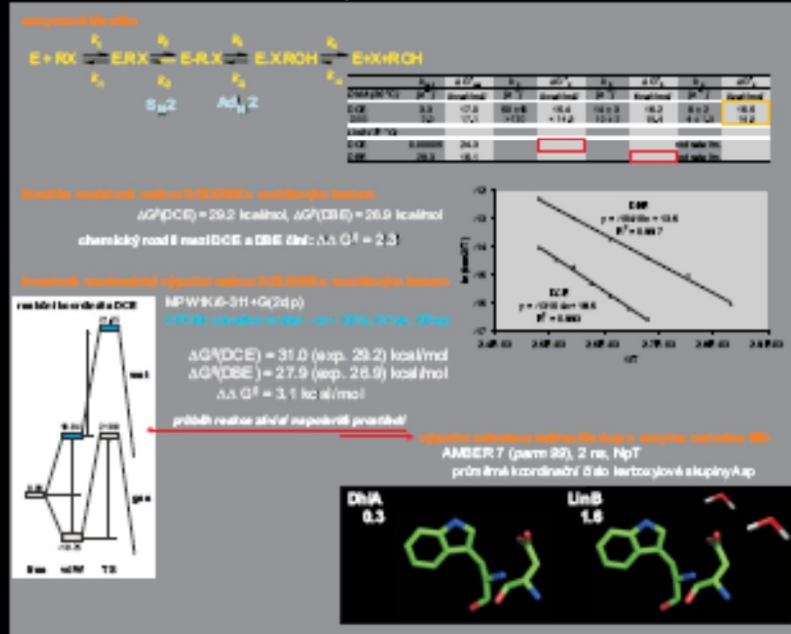
	DhIA haloalkan dehalogenaza struktura <i>Xanthobacter autotrophicus</i>	Enzym od křivky LinB haloalkan dehalogenaza z bakterie <i>Spingomonas paucimobilis</i>
k_{cat}	3.3	0.00005 ?
$[s^{-1}]$		
k_{cat}	3.0	29.3
	DCE 1,2 dichlorethan	DBE 1,2 dibromethan

Závěr:

Obrovský rozdíl v enzymatické katalýze reakce DCE/DBE enzymem LinB nelze vysvětlit rozdílem v chemismu obou látek. Kvantová chemické výpočty a molekulární dynamické simulace nabízejí jako pravděpodobné vysvětlení rozdílnou solvataci aktivního místa během enzymatické reakce. Potvrzení této hypotézy je předmětem dalšího studia.

Poděkování:

Děkujeme MŠMT ČR za udělení grantové podpory (MŠMT18555212, LC95A57), MetaCentru (meta.cesnet.cz) za výpočetní čas.



STUDIUM Ad_N REAKČNÍHO KROKU ENZYMŮ HALOGENALKANDEHALOGENÁZ METODAMI TEORETICKÉ CHEMIE



PAVEL BANÁŠ¹, MICHAL DTYEPA², JOSEF PROKOP¹, JIŘÍ DAMBORSKÝ¹

¹Katedra fyzikální chemie a Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů,
Univerzita Palackého Olomouc, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, ČR
²Loeschmidtovy laboratoře, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ČR



Halogenalkandehalogenázy (EC 3.8.1.5) jsou katalytické enzymy katalyzující hydrolýzu halogenovaných uhlovodíků na odpovídající alkohol a halogenid iont. Tyto enzymy nacházíme v environmentálně vydatné při odšouření halogenovaných uhlovodíků, pro jejich použití v bioremediaci. Halogenalkandehalogenázy patří k rodině α/β -hydrolázy jsou tvořeny hlavní doménou společnou pro celou rodinu α/β -hydrolázy a výškovou doménou, přičemž aktivní místo se nachází mezi těmito dvěma doménami (Obr. 1). V aktivním místě se nachází katalytická triáda: histidin-tyrosin-tyrosin (His-Tyr-Tyr).

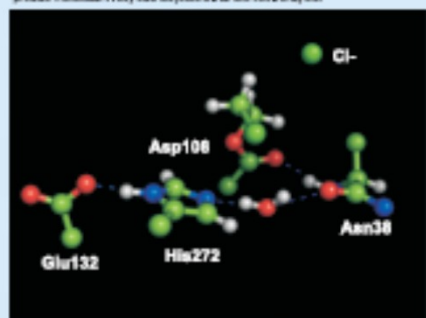
Reakční mechanismus je dvoufázový. Katalytický cyklus začíná katalýzou Asp108, která katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce. Odráždění halogenalkandehalogenázy je katalyzováno katalýzou Asp108, která katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce. Odráždění halogenalkandehalogenázy je katalyzováno katalýzou Asp108, která katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce.

První reakční krok je v katalýze Asp108, který katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce. Odráždění halogenalkandehalogenázy je katalyzováno katalýzou Asp108, která katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce. Odráždění halogenalkandehalogenázy je katalyzováno katalýzou Asp108, která katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce.

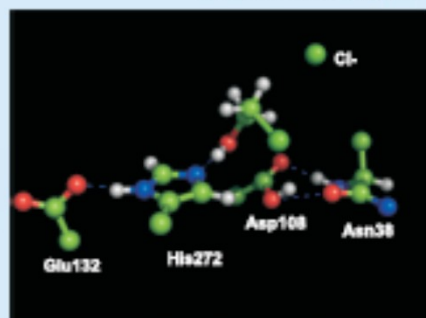
Katalýza katalýzou Asp108 je katalyzována katalýzou Asp108, která katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce. Odráždění halogenalkandehalogenázy je katalyzováno katalýzou Asp108, která katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce. Odráždění halogenalkandehalogenázy je katalyzováno katalýzou Asp108, která katalyzuje halogenalkandehalogenázy mechanismem S_N2 reakce.



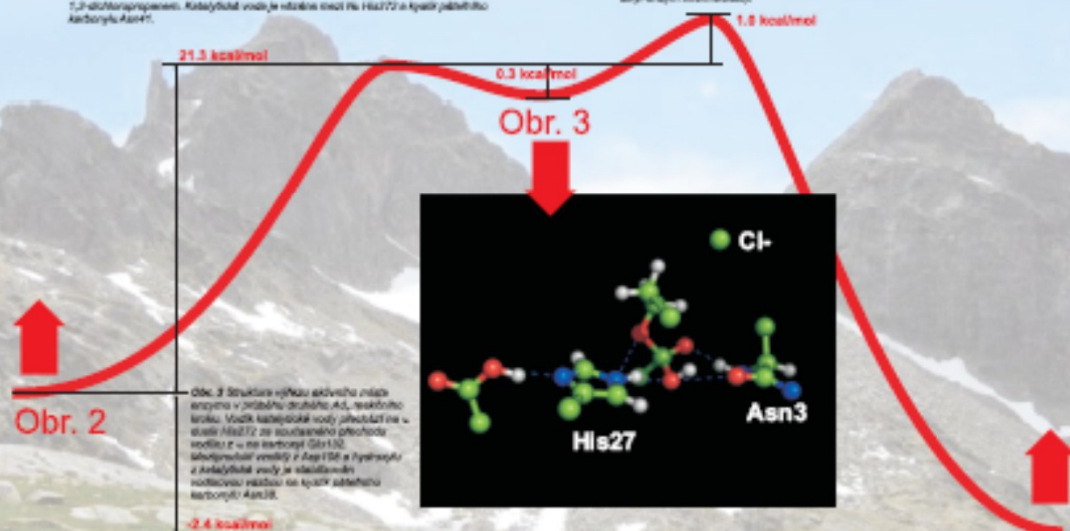
Obr. 1 Enzym Ad_N izolovaný z bakterie *Rhodococcus sp. peltol*



Obr. 2 Výhled aktivního místa alkyl-enzymu intermediátu enzymu Ad_N (Zahradnický et al., 2005) vzhledem ke svým katalytickým residuům (Asp108, His272 a Asn38) v Ad_N (Zahradnický et al., 2005). Katalytická triáda: Asp108, His272 a katalýza katalýzou Asp108.



Obr. 4 Struktura výhledu aktivního místa po druhém reakčním kroku (Ad_N , hydrolýza alkyl-enzymu intermediátu).



QM/MM výpočty jsou prováděny ONIOM modelem
B3LYP/6-31G(d,p)/AMBER(parm09)

Drobnosti, ale potěší

- s sebou zmenšené kopie posteru (A4), popř. vlastní reprinty publikací z dané oblasti
- navštívenky v případě získávání kontaktů
- pro panelovou diskuzi vhodný oděv, vystupování

Zkouška

- přehled o grafických formátech, typografii – písemka
- praktické dovednosti
 - vytvořit poster (velikost A1)
 - zmenšit a vytisknout (brevně) na A4 odevzdat (ideálně do 12. května)
 - téma bakalářské práce
 - poster bude hodnocen
- výsledné hodnocení – vážený průměr, písemka a poster