

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Průběžná / Závěrečná zpráva o realizaci projektu¹

1. Stručný přehled dílčích cílů projektu splněných v uplynulém období

Práce na projektu probíhala podle navrženého plánu a nedošlo k žádným mimořádným událostem, které by negativně ovlivnily jeho plnění. Tak jako ve Zprávě o plnění úkolů projektu za první pololetí letošního roku musím konstatovat, že úspěšné plnění úkolu je částečně způsobeno velkým zájmem ze strany českých i zahraničních studentů. Centrum se cíleně snaží vzbudit zájem ze strany studentů. Uspořádali jsem v letošním roce dvě školy, letní školu „Teoretické a výpočetní chemie“ v Praze a zimní školu „Výpočetní chemie a biochemie“ (Computational Chemistry and Biochemistry, přednášeno v angličtině pro mezinárodní audienci) v Nových Hradech. Zájem studentů předčil naše očekávání a první a druhé školy se zúčastnilo 35 a 25 studentů. Vezmeme-li v úvahu, že letní škola byla pořádána první týden v srpnu, tedy uprostřed prázdnin, je to zájem mimořádný. Na tomto místě je třeba konstatovat, že organizace obou škol, ale zejména té první, byla proveditelná jen díky možnostem, které nám poskytuje Centrum.

Počet studentů v Centru je značný (celkem 18 PhD a 10 “undergraduate”) a proto pořádáme pravidelné semináře, kde studenti referují (v anglickém jazyce) o výsledcích práce; navíc jsou také vedeni k aktivní účasti v diskusi vedené rovněž v anglickém jazyce. Naši studenti odjíždějí již během PhD studia na zahraniční stáže (viz dále). Recipročně, zahraniční studenti pracují v našem Centru. V letošním roce jsme hostili 2 studenty z Ukrajiny (2x3 měsíce) a 2 studenty z Polska (1x2 měsíce a 1x1 měsíc). Plánovaný pobyt studenta z Číny se neuskutečnil pro velmi nekooperativní jednání českého zastupitelského úřadu v Pekingu. Tento pobyt by se měl realizovat na počátku příštího roku. Z čínské strany by se měli v našem Centru vystřídat postupně 4 PhD studenti.

Mimořádné výsledky (viz dále) jsou dány skvělými výpočetními podmínkami, které jsme realizovali z prostředků Centra v loňském roce. 26 duálů Pentium III/800 MHz (tedy celkem 52 procesorů) nám slouží k rutinním výpočtům (kvantověchemické výpočty jakož i počítačové simulace). Pro náročné zejména kvantověchemické výpočty máme k dispozici 4-procesorový server Compaq Alpha ES-40 s 8 Gb paměti a 152 Gb diskového pole. Je třeba konstatovat, že jde o špičkový počítač (zejména pokud jde o paměť a diskový prostor). Všechny počítače, které v Centru máme, jsou plně využity. Na konci letošního roku byl rozšířen PC klastr o 21 duálních počítačů, osazených celkem 42 procesory AMD K7-MP 1800 MHz, 2 GB RAM a 40 GB diskového prostoru. Výpočetní kapacita PC klastru se tímto rozšířením více než ztrojnásobí a i v příštím roce tak budeme disponovat mimořádnou výpočetní kapacitou, která nám umožní konkurovat špičkovým evropským laboratořím. Díky celkové výpočetní kapacitě, kterou jsme realizovali z prostředků Centra, nemusíme, tak jako v minulosti, vyhledávat spolupráce se zahraničními partnery jenom proto, abychom mohli využít jejich výpočetní kapacitu.

Letos došlo také k významnému posílení pracovišť spoluřešitelů 1 a 3 výpočetní technikou nezbytně potřebnou k řešení plánovaných úkolů. Byly zakoupeny 2 výkonné klastry 10 počítačů PC Pentium III. Z neinvestičních prostředků spoluřešitele 1 byla navíc zřízena a zabezpečena laboratoř, ve které je nyní klastr umístěn.

¹ Zpráva podepsaná řešitelem, která byla schválena oponentním řízením, se současně se zápisem o oponentním řízení, (pokud bylo pořádáno) vyúčtováním za uplynulé období, upřesněním dílčích cílů a rozpočtu pro následující období zaslá v jednom vyhotovení zadavateli, (závěrečná zpráva se zaslá ve dvou vyhotoveních).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

V průběhu roku 2001 byl v Centru instalován zesílený laditelný femtosekundový laserový systém, který je unikátní v České republice a srovnatelný se systémy ve špičkových světových laboratořích. Je využíván mj. ke generaci tzv. Terahertzového záření a ke studiu dynamiky komplexních systémů v sub-milimetrové a milimetrové spektrální oblasti, která je jinak obtížně experimentálně dostupná.

V roce 2001 byla významně rozšířena laboratoř fluorescenční spektroskopie. Hlavní investicí se stal nákup dvou špičkových přístrojů pro měření fluorescenčních emisních spekter a časově rozlišených spekter dohasínání fluorescence v pikosekundovém režimu. Spolu se systémem diodových laserů a počítačovou kartou pro časově rozlišené počítání fotonů umožňuje posledně zmíněný přístroj unikátní kombinaci širokého excitačního rozsahu měření a vysokého časového rozlišení. Další investicí bylo rozšíření již zakoupeného přístroje pro měření fluorescenční korelace.

Kromě organizace dvou škol pro studenty jsme zorganizovali již III. Česko-israelskou konferenci, věnovanou tentokrát biomolekulám v plynné fázi a komplexním molekulárním systémům. Akce byla velmi úspěšná a další sympósium se bude konat za dva roky v Jerusalemě.

Integrace v Centru úspěšně pokračuje, jak lze dokumentovat prvními společnými publikacemi. Spolupráce se týká zejména těchto projektů: Studium nepravé vodíkové vazby (Nositel a spoluřešitel 3); Kvantověchemické studium vlastností těžších vzácných plynů (Nositel a spoluřešitel 1); Studium femtosekundové molekulové dynamiky (Nositel a spoluřešitel 2).

Mezinárodní spolupráce všech pracovišť Centra je stále intenzivnější, jak je dokumentováno řadou společných publikací a pozvání k seminářům na zahraniční university. Je potěšitelné, že totéž lze konstatovat i o studentech Centra.

V roce 2001 jsme publikovali celkem 38 prací v předních světových časopisech s vysokým impact factorem (např., Journal of American Chem. Society, J. of Physical Chemistry a J. of Chemical Physics), které byly financovány z prostředků Centra. Vzhledem ke krátké existenci Centra, uvádíme i celkový počet publikovaných prací za rok 2001 jichž je 58. Jsou uvedeny pouze práce publikované, práce zaslané do tisku, případně přijaté do tisku neuvádíme. Proto se celkový počet publikací jeví o něco menší než očekáváme v příštích letech práce na projektu Centra. Dalších 8 publikací bylo již přijato do tisku, ale vzhledem k tomu, že se objeví až v roce 2002 jsme je do celkového počtu publikací za rok 2001 nezahrnuli.

Citační indexy vybraných pracovníků Centra (Ota Bludský – 58, Pavel Hobza – 636, Zdenek Havlas – 84, Pavel Jungwirth – 78, Anatol Malijevsky – 32, Petr Nachtigall – 76, Vladimír Špirko – 152, Jiří Šponer – 327) dokumentují, že řešená výzkumná témata jsou velmi aktuální. Ukazují také na kvalitu vědeckého týmu. (Jsou uvedeny pouze citace za rok 2000, autocitace jsou vyloučeny).

Obsahem vědeckého projektu Centra je základní výzkum a proto v současné době nemáme žádnou spolupráci s aplikační sférou. Je však možné, že některé výstupy očekávané v blízké budoucnosti by mohly k takové spolupráci vést.

V Centru pracovalo v roce 2001 27 seniorů (celkový úvazek 15.5), 5 zahraničních pracovníků (celkový úvazek 1.1), 18 studentů PhD (celkový úvazek 4.2) a 10 “undergraduate” studentů. Celkový průměrný věk (kmenových pracovníků a studentů PhD) byl 32.0 let, při zahrnutí i “undergraduate” studentů se průměrný věk snížil na 28.0 let.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Řešitel musí závěrem úvodní části konstatovat, že skvělé možnosti Centra nám umožnily realizovat všechny zamýšlené vědecké i pedagogické projekty. Práce publikované za rok 2001 a Citační index za rok 2000 svědčí o vysoké kvalitě vědecké práce v Centru.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Nositel:

Zhodnocení:

Teoreticky i pokusně byl ověřen dvoustupňový mechanismus nepravé vodíkové vazby, která se tak zásadně liší od klasické jedностupňové vodíkové vazby.

Povrchy potenciální a volné energie párů basí nukleových kyselin v plynné fázi se liší, což platí zejména pro methylované báse; tento rozdíl dokumentuje úlohu entropie.

Mikrohydratace zásadním způsobem mění strukturu párů basí nukleových kyselin a např. již přítomnost 2 molekul vody indukuje změnu planárního páru adenin...thymín na pár patrový. (*Pavel Hobza*)

Byly nafitovány potenciály pro interakci malých molekul se systémy tranzitní kov-zeolit. Byla dokončena studie struktury a koordinace iontů ve vysokolilikátových zeolitických maticích.

Byla dokončena studie mechanismu desorbce H₂ z povrchu křemíku. (*Petr Nachtigall*)

Byla provedena detailní analýza vazby DAPI do úzkého žlábků DNA metodou počítačových simulací.

Byla provedena rozsáhlá kvantověchemická analýza vlivu metalace adeninu na jeho elektronovou strukturu a protonizační energie.

Kvantověchemickou metodou byla studována konformační plasticita a energetika komplexů cytosinu s transplatinou (*Jiří Šponer*).

Atmosferická chemie aerosolů mořské soli: Byla objasněna základní struktura povrchu aerosolu a relevantní fotochemie ve spolupráci s Prof. D. Tobiasem a Prof. B. J. Finlayson-Pitts na University of California, Irvine.

Struktura rozhraní vzduch-roztok elektrolytu: Bylo ukázáno, že v rozporu s tradiční teorií elektrolytu se ionty bromu a iodu chovají jako surfaktanty, tj. jejich koncentrace na rozhraní voda-vzduch je větší než v kapalně fázi.

V návaznosti na loňskou konferenční cestu do Argentiny byla navázána spolupráce s Prof. P. Crutzenem (Nobelova cena za chemii 1995).

Základní metodika a simulace molekulové dynamiky pro časově rozlišený femtosekundový experiment typu "optical pump - terahertz probe": Nový společný teoretický/experimentální projekt ve spolupráci s Dr. P. Kuželem (Centrum a FZÚ AV ČR) a Dr. B. Schmidtem (Freie Universität, Berlin) je v počáteční fázi.

Dynamika fotodisociace malých molekul v klastrech vzacných plynů: Objasněna závislost dynamiky provázející fotoexcitaci na umístění a počátečním vibračním stavu chromoforu.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Projekt ve spolupráci s Prof. U. Buckem (Max Planck Institut für Stromungsforschung, Göttingen) a D. a P. Nachtigallovými (Centrum a ÚFCH JH AV ČR).

Fotoelektronová spektroskopie a kvantová dynamika odtržení elektronu v komplexech halogenový anion - voda: Projekt ve spolupráci s Prof. U. Boeslem (TU Mnichov) se blíží k úspěšnému ukončení.

Dynamika elektronu slabě vázaného k silně polárním klastrům a molekulám: Rozvoj pseudopotenciálů a studium tunelové a vibrační dynamiky slabě vázaného "excess" elektronu ve spolupráci s Dr. V. Špírkem (Centrum a ÚFCH JH AV ČR) a Prof. O. Cheshnovskym (Tel Aviv University).

Elektronová struktura a dynamika excitovaných "charge-transfer-to-solvent" stavů anionu ve vodných roztocích: Nový projekt ve spolupráci s Prof. S. E. Bradfordthem na University of Southern California.

Spektroskopie v nanokapkách ^3He : Nový projekt ve spolupráci s Prof. A. I. Krylov na University of Southern California. (*Pavel Jungwirth*)

Byly navrženy a otestovány renormalizované "single-reference coupled-cluster" postupy pro ekonomický výpočet asymptot povrchů potenciální energie molekulových útvarů (spolupráce s P. Piecuchem z Michigan State University). (Významné pro studium vysoce excitovaných molekulových stavů). (*Vladimír Špirko*)

Bylo kompletováno studium vázaných stavů a nízko ležících stavů kontinua základního a prvně excitovaného elektronického stavu HeH_2^+ (spolupráce s W. Kraemerem z MPI für Astrophysik, Garching a F. Mrugalou z University of Torun). (Zásadní pro odhad role HeH_2^+ v tvorbě prvních kosmických objektů). (*Vladimír Špirko, Ota Bludský*)

Byla rozpracována metodika pro studium rotačně-vibrační dynamiky trojatomových útvarů v reprezentaci hypersférických souřadnic. (Otevření možnosti studia disociační dynamiky molekul s několika disociačními kanály). (*Vladimír Špirko*)

Dokončena studie interakcí malého žlábků B formy DNA s proteiny, léčivy a vodou založená na studiu krystalových struktur komplexů B-DNA. (*B. Schneider*)

Kvantitativní popis kinetiky dipolární relaxace v různých doménách biologických membrán

První demonstrace použití fluorescenční korelační spektroskopie při charakterizaci kondenzace DNA. (spolupráce s *M. Langnerem, Wroclaw*)

Použití Mica povrchů jako pevných nosičů umožňuje poprvé sledování podporovaných dvojvrstev pomocí fluorescenční korelační spektroskopie. (*M. Hof*)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Zahraníční cesty, stáže a pobyty

Senioři

Přednáškové turné po Číně, Hong-Kongu a Korei (26.4. – 11.5. 2001).

32. mezinárodní škola krystalografie v Erice, Sicilie, Itálie (20.5. – 3.6.2001).

Euresco konference "Isolované molekuly biologického zájmu" v Duesseldorfu, SRN (27.6. – 1.7.2001).

14. konference "Horizonty ve výzkumu vodíkové vazby" v Torinu, Itálie (3.9 – 7.9.2001).

2. konference "Koncept vodíkové vazby" v Bologni, Itálie (9.9. – 11.9. 2001)

3. konference Výpočetního střediska University Stuttgart, Stuttgart, SRN (7.10. – 10.10.2001)

Přednáška na Universitě ve Frankfurtu, Frankfurt am Main, SRN (10.10. – 11.10.2001)
(*Pavel Hobza*)

Euresco konference "Isolované molekuly biologického zájmu v Duesseldorfu, SRN (27.6. – 1.7.2001).

Mezinárodní konference "Elektronová struktura a reaktivita, Barcelona, 19. – 22. 9. 2001.

Mezinárodní konference "11. diskuze o biomolekulární struktuře a dynamice" a zasedání redakční rady Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, Albany, NY, USA, červen 2001.

Pracovní návštěva ETH-Zurich, květen 2001 (Jiří Šponer).

13. Mezinárodní konferenci o zeolitech (13th IZC) v Montpellier, Francie, ve dnech 7. 7. - 14. 7. 2001 (*Petr Nachtigall*).

Studijní pobyty u Prof. Josefa Michla na University of Colorado v Boulderu, Colorado, USA, březen 2001 a červen 2001, přednáška na "DURINT grant kick-off meeting" v Aberdeenu, MD, USA (19. 6. 2001)

Studijní pobyty u Prof. Frauenheima na Pederborn University v Paderbornu v Německu, červenec 2001 a listopad 2001. (*Jaroslav Vacek*)

Pracovní pobyt na University of Southern California, Los Angeles, 7 měsíců, visiting professor. Ústavní seminář a semináře ve skupině.

Pracovní pobyt na Hebrew University of Jerusalem, 4 měsíce, Lady Davis visiting professor. Semestrální přednáška pro studenty "Computational Atmospheric Chemistry", ústavní seminář a semináře ve skupině.

Pracovní pobyt na University of Pittsburgh, 1 týden, ústavní seminář, navázání spolupráce se skupinou Prof. K. D. Jordana.

International Conference on Molecular Quantum Mechanics, Seattle, červenec 2001, poster.

The Lisa Meitner-Minerva Center for Computational Quantum Chemistry Symposium on Electronic Structure, Jerusalem, říjen 2001, poster. (*Pavel Jungwirth*)

Studijní pobyt na MPI für Astrophysik, Garching, 5.6.-13.7. (*Vladimír Špirko*)

Pracovní pobyt na Bergische Universität Wuppertal, spolupráce se skupinou Prof. P. Jensena, (14 dní), studium Rennerova efektu (*Ota Bludský*)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

”7th Conference on Methods and Applications of Fluorescence: Spectroscopy, Imaging and Probes“, Amsterdam, 16.9 – 19.9.2001.

Free University Berlin a University Wroclaw, 29.5.2001 – 2.6.2001.

Pracovní pobyt na Universität Wuerzburg, spolupráce se skupinou Prof. F. W. Schneidera. (10 dní), (*M. Hof*)

Studenti

Studijní pobyt na Pennsylvania State University, USA (17.1. – 25.7.2001), laboratoř prof. Jamese B. Andersona; studium metody ”Diffusion Quantum Monte Carlo” (DQMC) (*Jana Chocholoušová*)

Studijní pobyt na University of Colorado, Colorado, USA (1.3 –10.8.2001), laboratoř prof. Josefa Michla; studium molekulárních rotorů na bázi carboranů metodami klasické molekulové dynamiky (*Alexandr Prokop*)

Studijní pobyt na Humboldt-Universität, ve skupině Prof. Sauera. Společná práce na modelování interakce vody s tranzitními kovy v zeolitech. (15.6.-31.7.) (*Markéta Davidová*)

Studijní pobyt na Universite Pierre et Marie Curie, LADIR/Spectrochimie Moleculaire, Paříž (24. 4. - 24.7. 2001), u prof. M. Lewerenz; studium metody ”Diffusion Quantum Monte Carlo”. (*Petr Slaviček*)

Studijní pobyt na Freie Universität Berlin, (24. 9. - 15. 12. 2001), u Dr. B. Schmidta, příprava simulací molekulové dynamiky pro časově rozlišený femtosekundový experiment typu "optical pump - terahertz probe". (*Petr Slaviček*)

Studijní pobyt na Max-Planck Institut für Astrophysik, Garching (2.5.-31.7., 21.11.-21.12.), u Dr. W.P. Kraemera, rotačně-vibrační dynamika v reprezentaci hypersférických souřadnic. (*Milan Šindelka*)

”5 th International Carl Zeiss Workshop on Fluorescence Correlation Spectroscopy and Related Methods” , Jena 25.4.- 27.4.2001, (*Martin Beneš*)

Studijní pobyt na ”University of Maastricht” 18.10. - 20.12.2001, ”Ellipsometry on supported bilayers” (*Martin Beneš*)

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2001

1. RI-MP2 calculations with extended basis sets – promising tool for study of H-bonded and stacked DNA base pairs, P. Jurečka, P. Nachtigall, and P. Hobza, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 3, 4578 (2001).
2. Hydrogen bonding, stacking and cation binding of DNA bases, J. Šponer, J. Leszczynski, and P. Hobza, *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 573, 43 (2001).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

3. At nonzero temperatures, stacked structures of methylated nucleic acid base pairs and microhydrated nucleic acid base pairs are favoured over planar hydrogen-bonded structures: a molecular dynamics simulations study, M. Kabeláč and P. Hobza, *Chem. Eur. J.* 7, 2067 (2001).
4. The H-index unambiguously discriminates between hydrogen bonding and improper blue-shifting hydrogen bonding, P. Hobza, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 3, 2555(2001).
5. Improper, blue-shifting hydrogen bond between fluorobenzene and fluoroform, B. Reimann, K. Buchhold, S. Vaupel, B. Brutschy, Z. Havlas, V. Špirko, and P. Hobza, *J. Phys. Chem. A* 105, 5560 (2001).
6. Hydrogen bonding and stacking interactions of nucleic acid base pairs: a density functional theory based treatment, M. Elstner, P. Hobza, T. Frauenheim, S. Suhai, and E. Kaxiras, *J. Chem. Phys.* 114, 5149 (2001).
7. Potential energy and free energy surfaces of all ten canonical and methylated nucleic acid base pairs: molecular dynamics and quantum chemical ab initio studies, M. Kabeláč and P. Hobza, *J. Phys. Chem. B* 105, 5804 (2001).
8. The nature of improper, blue-shifting hydrogen bonding verified experimentally, B.J. van der Veken, W. A. Herrebout, R. Szostak, D.N. Shchepkin, Z. Havlas, and P. Hobza, *J. Am. Chem. Soc.* 123, 0000 (2001).
9. Protonation of platinated adenine nucleobases. Gas phase vs. condensed phase picture. J. E. Sponer, J. Leszczynski, F. Glahe, B. Lippert, J. Sponer *Inorg. Chem* 40, 3269 (2001).
10. The influence of square planar platinum complexes on DNA base pairing. An ab initio DFT study. J.V. Burda, J. Sponer, J. Leszczynski, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 3, 4404 (2001).
11. A Systematic ab Initio Study of the Hydration of Selected Palladium Square – Planar Complexes. A comparison with Platinum Analogues. M. Zeizinger, J. V. Burda, J. Šponer, V. Kapsa, J. Leszczynski, *J. Phys. Chem. A* 105, 8086 (2001).
12. How Nucleobases Rotate when Bonded to a Metal Ion: Detailed View From an ab initio Quantum Chemical Study of a Cytosine Complex of trans-a2PtII .J.E. Sponer, F. Glahe, J. Leszczynski, B. Lippert, J. Sponer *J. Phys. Chem.* 105 B, 0000 (2001)
13. Characterization of Ag⁺ Sites in ZSM-5: A Combined Quantum Mechanics/Interatomic Potential Function Study, M. Šilhan, D. Nachtigallová, and P. Nachtigall, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 3, 4791 (2001).
14. Non-adiabatic interactions between the ground and low-lying excited electronic states: Vibronic states of the Cl-HCl complex, P. Ždánková, D. Nachtigallová, P. Nachtigall, and P. Jungwirth, *J. Chem. Phys.*, 115, 5974 (2001).
15. Theoretical interpretation of UV-VIS spectra of Cu- and Ag-species in zeolites: structure vs. transition energies, P. Nachtigall, M. Davidová, M. Šilhan, and D. Nachtigallová, In: *Zeolites and mesoporous materials at the dawn of the 21st century*. A. Galarneau, F. Di Renzo, F. Faujula and J. Védrine, Editors, Elsevier, Amsterdam, 2001, pages 14-O-03 (1-8). *Studies in Surface Science and Catalysis* **135**.
16. *Ab initio* simulation of Cu-species in zeolites: siting, coordination, UV-vis spectra and reactivity, J. Sauer, D. Nachtigallová, and P. Nachtigall, NATO ASI Series II, Vol. 13, "Catalysis by Unique Metal Ion Structures in Solid Matrices. From Science to Application", p 221, G. Centi, B. Wichterlová, and A.T. Bell, Editors, KLUWER, 2001.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

17. The Concerted Use of Slab and Cluster Models in and Ab Initio Study of Hydrogen Desorption from the Si(100) Surface, J. A. Steckel, T. Phung, K. D. Jordan, and P. Nachtigall, *J. Phys. Chem. B*, 105, 4031 (2001).
18. Tobias, D. J.; Jungwirth, P.; Parrinello, M.: Surface solvation of halogen anions in water clusters: An ab initio molecular dynamics study of the Cl-(H₂O)₆ complex. *J. Chem. Phys.*, 114 (2001) 7036.
19. Jungwirth, P.; Tobias, D. J.: Chloride anion on aqueous clusters, at the air-water interface, and in liquid water: Solvent effects on Cl⁻ polarizability. *J. Phys. Chem. 105A* (2001) 0000.
20. Jungwirth, P.; Tobias, D. J.: The molecular structure of salt solutions: A new view of the interface with implications for heterogeneous atmospheric chemistry. *Journal of Physical Chemistry B*, 105 (2001) 10468.
21. Slavicek, P.; Roeselova, M.; Jungwirth, P.; Schmidt, B.: Preference of cluster isomers as a result of quantum delocalization: Potential energy surfaces and intermolecular vibrational states of Ne...HBr, Ne...HI, and HI(Ar)_n (n=1-6). *Journal of Chemical Physics*, 114 (2001) 1539.
22. Jungwirth, P.; Krylov, A. I.: Small doped 3He clusters: A systematic quantum chemistry approach to fermionic nuclear wavefunctions and energies. *Journal of Chemical Physics*, 114 (2001)0000
23. Jungwirth P.: Chemical oscillations based on photoautocatalysis of ozone. *Chemical Physics Letters*, 342 (2001) 287.
24. Can ordinary single-reference coupled-cluster methods describe potential energy surfaces with nearly spectroscopic accuracy? The renormalized coupled-cluster study of the vibrational spectrum of HF. Piecuch P., Kucharski S.A., Špirko V., Kowalski K., *Journal of Chemical Physics* 115, 5796 (2001)
25. Bound and low-lying quasi-bound rotation-vibration energy levels of the ground and first excited electronic states of HeH₂⁺. Kraemer W.P., Špirko V., Bludský O., *Chemical Physics*, 274, (2001) 0000
26. Potential energy surface and ro-vibrational energies of Ne₃⁺ in the ground electronic state. Šindelka M., Špirko V., Urban J., Mach P., Leszczynski J., *Int. J. Quantum Chem.* 85 (2001) 000
27. Critical Evaluation of the Prediction of the Dissociation Energy and the Energy Spectrum of the Ground State of KRb by the Reduced Potential Curve Method. Bludský O., Jenč F., *Journal of Molecular Spectroscopy* 207, 1 (2001)
28. Coumarine 6, Resorufin, Hypericine, and Flavins: Suitable Chromophores for Fluorescence Correlation Spectroscopy of Biological Molecules. M. Beneš, J. Hudeček, P. Anzenbacher, and M. Hof, *Collect. Czech. Chem. Comm.*66, 855 (2001)
29. n-Anthroyloxy fatty Acids: a Unique Set of Fluorescent Probes for the Investigation of Membrane Structure and Dynamics, R. Hutterer and M. Hof, in 'Recent Research Developments in Lipids', editor S. G. Pandalai, Transworld Research Network, Vol 5, 71-83, (2001).

Název projektu : Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Seznam ostatních publikací za rok 2001

30. Coordination of Cu⁺ and Cu²⁺ ions in ZSM-5 in the vicinity of two framework Al atoms, D. Nachtigallová, P. Nachtigall, and J. Sauer, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 3, 1552 (2001).
31. Computational Study of Interaction of Cu⁺ with Ferrierite: Structure, Coordination, and Photoluminescence Spectra, P. Nachtigall, M. Davidová, D. Nachtigallová, and J. Sauer, *J. Phys. Chem. B*, 105, 3510 (2001).
32. State-specific Brillouin-Wigner multireference coupled cluster study of the singlet-triplet separation in the tetramethyleneethane diradical, J. Pittner, P. Nachtigall, P. Čárský, and I. Hubač, *J. Phys. Chem. A*, 105, 1354 (2001).
33. Interaction of hydrated Mg²⁺ cation with bases, base pairs, and nucleotides, J. Munoz, J. Šponer, P. Hobza, M. Orozco, and F.J.Luque, *J. Phys. Chem. B* 105, 6051 (2001).
34. Hoogsteen and stacked structures of the 9-methyladenine...1-methylthymine pair are populated equally at experimental conditions: ab initio and molecular dynamics study, F. Ryjáček, O. Engkvist, J. Vacek, M. Kratochvíl, and P. Hobza, *J. Phys. Chem. A* 105, 1197 (2001).
35. Vacek, J., Michl, J. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **98**, 5481, (2001).
36. Multidimensional WKB approximation and the lifetime calculation, Zamastil J., Špirko V., Čížek J., Skála L., Bludský O., *Phys.Rev.* 64, 042101 (2001).
37. Inversion splittings of SiH₃⁻. An ab initio study. Špirko V., Kraemer W.P., *J.Mol.Struct.* 547, 139 (2001).
38. Molecular dynamics of DNA quadruplex molecules containing inosine, 6-thioguanine and 6-thiopurine. R. Štefl, N. Špačková, I. Berger, J. Koča, J. Šponer, *Biophys. J.* 80, 455 (2001).
39. Structural dynamics and cation interactions of DNA quadruplex molecules containing mixed GCGC quartets. N. Špačková, I. Berger, J. Šponer: *J. Am. Chem. Soc.* 123, 3295 (2001).
40. The Nucleic Acid Database (NDB). H.M. Berman; Z. Feng; B. Schneider; J. Westbrook; C. Zardecki: pages 657-662 in International Tables of Crystallography, Volume F: Crystallography of Biological Molecules (M.G. Rossmann; E. Arnold, eds.), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2001).
41. The PDB Data Uniformity Project. T.N. Bhat; P.E. Bourne; Z. Feng; G. Gilliland; S. Jain; B. Schneider; K. Schneider; N. Thanki; H. Weissig; J. Westbrook; H.M. Berman: *Nucl.Acids Res.* **29**, 214 (2001).
42. Fluorescent Dyes for Probing Solvent Relaxation in Biomembranes. M. Hof, P. Kapusta, V. Fidler, M. Nepraš, J. Urbanec, & R. Hutterer, *Latvian Journal of Physics and Technical Sciences* 6, 183, (2000; since appeared 2001, not listed in the 2000 report)
43. Dynamics in Diether Lipid Bilayers and Interdigitated Bilayer Structures Studied by Time-Resolved Emission Spectra, Decay Time and Anisotropy Profiles. R. Hutterer & M. Hof, *J. Fluor.* 11(3), 227 (2001).

Přednášky na konferencích a universitách za rok 2001

(Přednášky v rámci seminářů Centra nejsou uvedeny.)

Senioři

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

1. Molecular Interactions, P. Hobza, University of Sichuan, Cheng-du, Čína, 30.4.2001.
2. Improper blue-shifting hydrogen bonding, P. Hobza, University of Sichuan, Cheng-du, Čína, 1.5.2001.
3. Structure and dynamics of DNA base pairs, P. Hobza, University of Sichuan, Cheng-du, Čína, 3.5.2001.
4. Improper blue-shifting hydrogen bonding, P. Hobza, City University of Hong-Kong, Hong-Kong, 7.5.2001.
5. Structure and dynamics of DNA base pairs, P. Hobza, Chinese University of Hong-Kong, Hong-Kong, 8.5.2001.
6. Molecular Interactions, P. Hobza, Pohang University, Korea, 10.5.2001.
7. Improper blue-shifting hydrogen bonding, P. Hobza, Pohang University, Korea, 10.5.2001.
8. Improper blue-shifting hydrogen bonding: theory and experiment, P. Hobza, 32. International School of Crystallography, Erice, Sicily, May 20 – June 3. 2001 (Invited lecture).
9. Theoretical calculations on molecular clusters, P. Hobza, 32. International School of Crystallography, Erice, Sicily, May 20 – June 3. 2001 (Invited lecture).
10. Potential energy and free energy surfaces of nucleic acid base pairs, P. Hobza, Euresco Cobnference "Isolated molecules of biological interest", Duesseldorf, Germany (Invited lecture).
11. Improper blue-shifting hydrogen bonding, P. Hobza, Horizons in hydrogen bond research, XIV Conference, Torino, Italy, September 3 – 7, 2001 (Invited lecture).
12. Improper blue-shifting hydrogen bonding, P. Hobza, The great hydrogen bond contest II, Bologna, Italy, September 10 – 11, 2001 (Invited lecture).
13. Structure and dynamics of DNA base pairs, P. Hobza, J.W. Goethe University of Frankfurt, Frankfurt am Main, October 11, 2001.
14. Potential energy and free energy surfaces of nucleic acid base pairs, P. Hobza, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
15. Molecular Interactions of nucleic acid bases. From Ab initio computations to Molecular Dynamics simulations. Jiří Šponer, International conference: Isolated molecules of Biological Interest, Dusseldorf, červen 2001 (Invited lecture)
16. Molecular Interactions of nucleic acid bases. Jiří Šponer, International conference: Electronic Structure and Chemical Reactivity, Barcelona, Španělsko, září 2001 (Invited lecture)
17. Interactions of DNA bases and their influence on DNA structure and Dynamics. Jiří Šponer, ETH – Zurich, květen.
18. Molecular Dynamics of Guanine Quadruplex, J. Šponer, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
19. Simulation of DNA elastic properties, F. Lankaš, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
20. Double tunneling: An overlooked quantum effect in anionic molecular clusters, P. Jungwirth, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

21. Solvent relaxation in Biomembranes, Martin Hof, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
22. Electron photodetachment in halogen – water clusters: From the classical to the quantum description, M. Roeselová, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
23. MD simulations on intercalation of ethidium (model intercalator) to DNA, F. Ryjáček, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
24. Interaction of transition metal ions with zeolites framework, P. Nachtigall, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
25. Molecular Tinkertoy Construction kit: Computer Simulations of Molecular Propellers in Rotating Electric Field, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
26. Calculation of NMR spin-spin coupling constants in DNA bases, V. Sychrovský, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
27. Continuum states of Molecular Clusters, V. Špirko, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
28. Vibrational Dynamics of molecules and molecular clusters in electronically excited states, Ota Bludský, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
29. Electronic potential energy surface of an excited state from absorption spectrum, P. Ždánková, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
30. Molekulové interakce, P. Hobza, Palackého Universita Olomouc, Olomouc, 14. února 2001.
31. Struktura a dynamika párů basí DNA, P. Hobza, Masarykova Universita Brno, Brno, 4. října 2001.
32. Overlap Between Experimental and Theoretical Studies of Transition Metal Ion /Zeolites Systems. P. Nachtigall; 33rd Symposium on Catalysis, November 5-6, 2001, Prague, Czech Republic. (Plenary lecture)
33. Theoretical interpretation of UV-VIS spectra of Cu- and Ag-species in zeolites: structure vs. transition energies. P. Nachtigall, M. Davidová, M. Šilhan, and D. Nachtigallová; 13th International Zeolite Conference, July 8-13th 2001, Montpellier, France.
34. Calculation of NMR spin-spin coupling constants in DNA bases. V. Sychrovský, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
35. DFT Calculation of NMR Spin – Spin Coupling Constants in Adenine, Thymine, Cytosine, and Guanine, V. Sychrovský, J. Vacek, P. Hobza, and V. Sklenář, 16th NMR Valtice, April 23-25, 2001.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

36. MD simulations (free energy) on interclation of ethidium to DNA, F. Ryjáček, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
37. Molecular Tinkertoy Construction Kit: Computer Simulations of Molecular Propellers. Jaroslav Vacek, 3rd Czech-Israeli bianual conference on Biomolecules in the Gas Phase and Complex Molecular Systems. Prague, April 20-22, 2001.
38. Molecular Tinkertoy Construction Kit: Computer Simulations of Molecular Propellers. Jaroslav Vacek, DURINT grant kick-off meeting, Aberdeen Proving Grounds, Aberdeen, MD, USA, 19. 6. 2001.
39. Gas phase solvation of 7-azaindole dimer, Jaroslav Vacek, University of Paderborn, Paderborn, Německo, 17. 7. 2001.
40. Molecular Tinkertoy Construction Kit: Computer Simulations of Molecular Propellers. Jaroslav Vacek, University of Paderborn, Paderborn, Německo, 24. 7. 2001.
41. Ion-enhanced interfacial atmospheric chemistry of aqueous sea-salt aerosols, Pavel Jungwirth, Max Planck Institut für Chemie, Mainz, SRN, 24. 1. 2001.
42. A Quantum Chemical Approach to Nuclear Dynamics and Spectroscopy of Doped ³He nanodroplets, Pavel Jungwirth, University of Southern California, Los Angeles, 16. 5. 2001.
43. Atmospheric chemistry of sea-salt aerosols, Pavel Jungwirth, University of Southern California, Los Angeles, 20. 6. 2001.
44. Ultrafast spectroscopy and rotational control in cryogenic inert clusters, Pavel Jungwirth, University of Pittsburgh, 4. 5. 2001.
45. Simple salt solutions: A new view of the interface with implications for atmospheric chemistry, Pavel Jungwirth, Hebrew University of Jerusalem, 11. 10. 2001.
46. B. Schneider: PDB – an Insider’s View. CSCA meeting ‘Structure’, Bedrichov, June 20, 2001.
47. Zdeněk Morávek, Stephen Neidle, and Bohdan Schneider: Protein and drug interactions in the minor groove of B-DNA. 20th European Crystallographic Meeting, Krakow, Poland, August 26, 2001.
48. Helen M. Berman, Zukang Feng, Lisa Iype, Xiang-Jun Lu, Wilma K. Olson, Bohdan Schneider, John Westbrook, Christine Zardecki: The Nucleic Acid Database. 20th European Crystallographic Meeting, Krakow, Poland, August 27, 2001.
49. B. Schneider, Z. Feng, J. Westbrook, H.M. Berman: Data Deposition and Data Processing at the Protein Data Bank. Invited lecture, 20th European Crystallographic Meeting, Krakow, Poland, August 30, 2001.
50. B. Schneider: Protein Databases. Crystallization Course, Photosynthetic Research Center, South Bohemian University, Nove Hrad, October 8, 2001.
51. M. Hof: Solvent Relaxation in Biomembranes, 3 th Workshop on Molecular Photophysics and Dynamics , Prague, 17.3.2001, (Invited lecture)
52. M. Hof: New Applications of FCS, Physikalische Chemie, University Wuerzburg, 22.3.2001
53. M. Hof: Solvensrelaxation in Biomembranen, University Leipzig, Chemiedozententagung, 21.03.2001
54. M. Hof: Solvent Relaxation in Biomembranes, Institute of Physics, FU Berlin, 30.5.2001
55. M. Hof: DNA condensation characterised by FCS, University Wroclaw, Institute of Biochemistry, 31.5.2001
56. M. Hof: Solvent Relaxation in Phospholipid Bilayers, Seventh Conference on Methods and Applications of Fluorescence, Amsterdam, 16.9.2001, (*zvaná úvodní přednáška*)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

57. M. Hof: Solvent Relaxation: A new Method for Probing Microviscosity and –Polarity in Phospholipid Bilayers, Univerzita Palackého v Olomouci, 21.11. 2001.

Studenti

1. Preference of cluster isomers as a result of quantum delocalization, P. Slavíček, 3rd Czech-Israeli Biannual conference on biomolecules in the gas phase and complex molecular systems, Prague, April 20-22, 2001.
2. Theoretical Study of Interaction of Small Molecules with Cu^+ Ions in Zeolites: ZSM-5 vs. FER. M. Davidová; 33rd Symposium on Catalysis, November 5-6, 2001, Prague, Czech Republic.
3. Interaction of Small Molecules with Cu^+ Ions in Zeolites. . M. Davidová; Seminář studentů ÚFCH JH, AV ČR, 4. července, Praha.
4. Theoretical Study of the Coordination and Siting of Ag^+ Ions in the zeolite ZSM-5. M. Šilhan; Seminář studentů ÚFCH JH, AV ČR, 4. července, Praha.
5. Nature of Stacking Interactions between Intercalators and DNA Base Pairs. D. Řeha; Seminář studentů ÚFCH JH, AV ČR, 4. července, Praha.
6. Intercalators – Free Energy Calculations of Intercalation of Ethidium into DNA. M. Hanus; Seminář studentů ÚFCH JH, AV ČR, 4. července, Praha.
7. RI-MP2 Calculations with Extended Basis Sets – Promising Tool for Study of H-bonded and Stacked DNA Base Pairs. P. Jurečka; Seminář studentů ÚFCH JH, AV ČR, 4. července, Praha.
8. Structure control in molecular clusters, Petr Slavíček, Charles Coulson Summer School on Quantum Dynamics, Oxford, 14.-26. srpna 2001.
9. Preference of cluster isomers as a result of quantum delocalization, Petr Slavíček, Université Pierre et Marie Curie, LADIR/Spectrochimie Moléculaire, Paříž, 26. 6. 2001.
10. Electron photodetachment in anionic clusters: Spectroscopy and quantum dynamics, Martin Mucha, seminář studentů ÚFCH JH AV ČR, Praha, 4. června 2001.

Postery na konferencích za rok 2001

1. *Theoretical Study of NO and CO Interaction with TMI in High-Silica Zeolites: Cu^+ vs. Ag^+ Ions.* M. Davidová, M. Šilhan, P. Nachtigall; 33rd Symposium on Catalysis, November 5-6, 2001, Prague, Czech Republic.
2. *Improper blue-shifting hydrogen bonding.* P. Hobza, B. Brutschy, 3rd Conference of Computer Center of Univesrity Stuttgart, November 7-9, 2001, Stuttgart, Germany.
3. *Structure and Dynamics of Glycine: Theory & Experiment.* Ota Bludský, Jana Chocholoušová, Jaroslav Vacek, Pavel Hobza and Friedrich Huisken; Conference on Dynamics of Molecular Collisions, July 15 – 20, 2001, Copper Mountain Resort and Conference Center, Copper Mountain, Colorado, USA.
4. *A Systematic Quantum Chemistry Approach to Nuclear Dynamics of Doped ^3He Clusters.* Pavel Jungwirth and Anna I. Krylov; International Conference on Molecular Quantum Mechanics, Seattle, červenec 2001.
5. *A Systematic Quantum Chemistry Approach to Nuclear Dynamics of Doped ^3He Clusters.* Pavel Jungwirth and Anna I. Krylov; The Lisa Meitner-Minerva Center for Computational Quantum Chemistry Symposium on Electronic Structure, Jerusalem, říjen 2001.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

6. *Fifth International Conference on MATERIALS CHEMISTRY*, University of Wales, Bangor, 23.7.-29.7.,UK (*Vladimír Špirko*).
7. *Adsorption of Phospholipids to Hydrophilic Surfaces Characterized by FCS*, M. Beneš, D. Billy, W. T. Hermens, and M. Hof, The 5 th International Carl Zeiss Workshop on Fluorescence Correlation Spectroscopy and Related Methods, Jena 25.4. - 27.4.2001
8. *FCS measurements of DNA plasmide condensation*, Teresa Kral, Martin Beneš, Dagmara Baczyńska, Maciej Ugorski, Marek Langner, and Martin Hof. The 5 th International Carl Zeiss Workshop on Fluorescence Correlation Spectroscopy and Related Methods, Jena 25.4. - 27.4.
9. *FCS as a Tool for DNA Condensation Measurements*, Teresa Kral, Martin Hof and Marek Langner, 8 th International Symposium on Molecular Aspects of Chemotherapy, Gdansk 5.9. - 9.9.2001)
10. *Formation of Supported Phospholipid Blayers Investigated by FCS*. M. Beneš, W. T. Hermens, and M. Hof. Seventh Conference on Methods and Applications of Fluorescence', Amsterdam 16.9 - 19.9.2001).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Organizace konferencí, letních a zimních škol

3rd Czech-Israeli bianual conference on Biomolecules in the Gas Phase and Complex Molecular Systems. Prague, April 20-22, 2001.

Bylo pozváno 11 čelných představitelů israelské vědy (včetně bývalého prezidenta israelské akademie věd Prof. Joshui Jortnera) a jeden zvláštní host z Polska. Za českou stranu se účastnilo naše Centrum. Přednášky se týkaly zejména biomolekul a to jak teoretických výpočtů tak experimentů, ale také komplexních molekulárních systémů jako jsou zeolity a nové materiály.

1rd Czech-Polish Seminar on Application of Fluorescence Spectroscopy in Bioscience, Sloup, Listopad, October 5-7, 2001.

Zúčastnilo se 16 studentů a vědeckých pracovníků ze skupiny doc. M. Hofa a prof. M. Langnera (universita Wroclaw).

Letní škola Teoretické a výpočetní chemie

V době od 30. července do 3. srpna jsme uspořádali v prostoách ÚFCH JH „1. Letní školu teoretické a výpočetní chemie“. Akce se setkala s mimořádným zájmem studentů (a to jak doktroandů, tak i studentů magisterského studia) prakticky ze všech českých univerzit majících chemickou fakultu. Na přednáškách pro 32 registrovaných studentů se podíleli členové tří pracovišť Centra: Bludský, Hobza, Nachtigall, Ryjáček a Vacek z ÚFCH, Malijevski z VŠCHT a Rulíšek z ÚOChB. Důležitou součástí letní školy byla praktická cvičení na počítačích, která vedli doktorandi z Centra. Letní školu je možno považovat za velice úspěšnou.

Winter School of Computational Chemistry and Biochemistry, Nové Hrady, 12. – 16. 11. 2001 (Pavel Hobza, Vladimír Sychrovský, Jaroslav Vacek, Jana Chocholoušová, Filip Ryjáček a Alexandr Prokop).

Zimní škola výpočetní chemie a biochemie proběhla v rámci mezinárodního studijního programu na jihočeské univerzitě v listopadu v Nových Hradech. Školy se účastnilo 25 posluchačů z českých univerzit a ústavů AVČR a Rakouska. Cílem školy bylo přiblížit moderní metody výpočetní chemie studentům a naučit je provádět jednodušší výpočty a simulace, se zvláštním důrazem na aplikace v biochemii. Součástí výuky byla i prezentace nemodernějšího hardware pro vizualizaci biomolekul. Tyto cíle se nám podařilo beze zbytku splnit a školu lze hodnotit jako velmi úspěšnou.

Hosté Centra

1. Prof. P. Cieplak, University of Warsaw, seminář
2. Prof. U. Roethlisberger, ETH Zurich, seminář
3. Dr. J. Steckel, University of Vienna, seminář
4. Prof. Dr. V. Sklenář, Masarykova univerzita Brno, ústavní seminář
5. Dr. W.P. Kraemer, MPI Garching

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

6. Prof. P. Piecuch, Michigan State University, seminář
7. Prof. M. Langner, University of Wrocław, seminář
8. Prof. A. Sikorski, University of Wrocław
9. Prof. A. Kozubek, University of Wrocław
10. Prof. J. Heberle, Forschungszentrum Juelich, Germany, seminář
11. Dr. Raz Jelinek, Ben Gurion University, Israel, seminář
12. Prof. V. Mudogo, University Kinshasa

Výuka na univerzitách

1. *Computational Atmospheric Chemistry*, Pavel Jungwirth, semestrální přednáška pro studenty, Hebrew University of Jerusalem.
2. *Klasická a kvantová molekulová dynamika*, Martina Roeselová, semestrální přednáška pro studenty, MFF UK Praha.
3. *Atomová a molekulová spektroskopie*, Vladimír Špirko, FJFI Praha.
4. *Metody stanovení a popisu molekulových struktur*, Bohdan Schneider, MFF UK a VŠChT Praha.
5. *Molecular Physics*, Martin Hof, CVUT, Praha
6. *Teoretická a výpočetní chemie*, Pavel Hobza, semestrální přednáška pro studenty, PŘF UK Praha.
7. *Teoretická a výpočetní biochemie*, Pavel Hobza a Jaroslav Vacek, semestrální přednáška pro studenty, JČU České Budějovice.
8. *Úvod do kvantové chemie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, zimní semestr.
9. *Kvantové chemie - spektroskopie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, zimní semestr.
10. *Metody kvantové chemie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, letní semestr.
11. *Kvantově chemické aplikace*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, letní semestr.

Popularizace vědy

Prezentace Centra na dni otevřených dveří AV ČR, 19. a 20. 10. 2001.

Tento audiovizuální program byl navržen AV ČR do programu popularizace vědy, který by měl probíhat v kanceláři AVČR, Národní 1, Praha 1.

Co je Web of Science aneb jak hodnotit vědeckou práci, Václav Hořejší a Pavel Hobza, Vesmír 80, 548 (2001).

Ocenění

Annual medal of the International Academy of Quantum Molecular Sciences (*Pavel Jungwirth*). (Cena se uděluje jednou za rok pro badatele do 35 let, jde o jednu z nejprestižnějších světových cen udělovaných v kvantově-molekulárních vědách).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Cena ministra školství, mládeže a tělovýchovy za vědu za rok 2000 (*Pavel Hobza a Jiří Šponer*).

Cena České společnosti chemické za katalýzu, 2001 (*Markéta Davidová*)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Spolunositel 1:VŠCHT

Zhodnocení:

Ve spolupráci s Prof. L. L. Lee, University of Oklahoma, byla navržena nová samokonsistentní teorie struktury a termodynamických vlastností binárních směsí. (A. Malijevský)

Ve spolupráci s RNDr. M. Strnadem, ÚCHP AV ČR, byla navržena nová metoda simulace (Monte Carlo, grandkanonický soubor) pro vysoce asymetrické směsi, tj. směsi, jejichž složky jsou tvořeny molekulami významně odlišné velikosti. Jedná se o základní model koloidních soustav. Jedná se rovněž o řešení fundamentálního problému existence, či neexistence entropicky řízených fázových přechodů u systémů, jejichž složky se liší jen velikostí. (A. Malijevský)

Ve spolupráci s Prof. G. A. Martynovem, Ústav fyzikální chemie Moskva, AV Ruské federace, byl navržen nový uzávěr Ornsteinovy - Zernikeho integrální rovnice pro tzv. jednoduché tekutiny. (A. Malijevský a I. Odvárková)

Byl podrobně analyzován vliv systematických a statistických chyb v počítačových pseudoexperimentech a vypočtena můstková funkce z párové distribuční funkce. Práce má zásadní význam pro teorie tekutin (J. Kolafa, S. Labík, A. Malijevský)

Byla navržena nová metoda simulace chemických potenciálů složek ternárních směsí (Al. Malijevský, S. Labík)

Ve spolupráci s Dr. A. Santosem (Univesidad de Extremadura, Badajos, Španělsko) a Dr. M. López de Haro (UNAM, Mexiko) byla studována lokální struktura tříložkových směsí tekutin. (Al. Malijevský, S. Labík, A. Malijevský)

Byly studovány globální fázové diagramy pro novou, teoreticky podloženou, stavovou rovnici. (J. Bumba, J. Kolafa)

Byla navržena nová stavová rovnice pro aditivní směs tuhých koulí (základní referenční systém pro reálné směsi), založená na známých viriálních koeficientech a nových teoretických vazných podmínkách (J. Veverka, A. Malijevský)

Byl navržen nový algoritmus pro výpočet párových distribučních funkcí a termodynamických veličin složitých molekulárních tekutin a jejich směsí. (S. Labík, T. Hujo, P. Morávek)

Byl vytvořen program pro výpočet tzv. elementárních diagramů (do druhého řádu) pro jednosložkové a dvousložkové tekutiny (Al. Malijevský, H. Gabrielová, S. Labík)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Ve spolupráci s řešitelem (P. Hobza, P. Slavíček), RNDr. Kalusem (Ostravská Universita) a P. Paškou (Technická Universita Ostrava) byly pomocí kvantověchemických *ab initio* metod studovány vlastnosti těžších vzácných plynů. (*I. Odvárková, A. Malijevský*)

Uvedené výsledky jsou většinou zcela nové a budeme je dále rozvíjet. Výsledky byly předběžně prezentovány na domácích a na prestižních mezinárodních konferencích. S finalizací a publikováním v odborných časopisech počítáme v příštím roce a dalších letech.

Chtěli bychom zdůraznit neformální a synergickou spolupráci s pracovištěm řešitele a s kolegy z Ostravy na ambiciózním projektu výpočtu kvantitativně přesných makroskopických vlastností argonu, kryptonu a xenonu bez jakýchkoliv nastavitelných konstant. Domníváme se, že úspěch bude "výkladní skříní" výsledků spolupráce kvantové chemie a statistické termodynamiky, byť za stávající výpočetní techniky a teoretických poznatků možný jen pro jednoduché systémy.

Zahraníční cesty, stáže a pobyty

Senioři

Thermodynamics 2001 (17th Thermodynamics Conference), Bristol UK, 4. - 6. 4. 2001 (*A. Malijevský, M. Strnad*)

IUPAC 21st International Conference on Statistical Physics (Statphys 21), Cancun Mexico, 15. - 20. 7. 2001 (*A. Malijevský, S. Labík*)

Studijní pobyt u Dr. M. Lopez de Haro (UNAM) a Dr. A. Gill (UAM), Mexiko, 21. - 28.7.2001 (*A. Malijevský, A. Labík*)

76th International Bunsen Discussion Meeting. Global Phase Diagrams. Walberberg, Germany, 19. - 22. 8. 2001 (*A. Malijevský, J. Kolafa*)

58. Zjazd chemických spoločností, 3. - 6. 9. 2001, Banská Bystrica, Slovensko, (*A. Malijevský, S. Labík*)

Studenti

76th International Bunsen Discussion Meeting. Global Phase Diagrams. Walberberg, Germany, 19. - 22. 8. 2001 (*J. Bumba*)

59. Zjazd chemických spoločností, 3. - 6. 9. 2001, Banská Bystrica, Slovensko, (*I. Odvárková, J. Bumba, P. Morávek, A. Malijevský*)

Studijní pobyt o Dr. A. Santose, Badajoz, Španělsko 15. - 29. 11. 2001.

Samostatné studentské práce financované z prostředků projektu:

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

1. Jan Veverka: Systematická studie stavových rovnic tuhých koulí a jejich binárních aditivních směsí. Diplomová práce (*vedoucí A. Malijevský*), Fakulta chemicko-inženýrská, VŠCHT Praha, červen 2001.
2. Tomáš Hujo: Řešení Ornsteinovy-Zernikeho integrální rovnice pro směsi molekulárních tekutin. Diplomová práce (*vedoucí S. Labík*), Fakulta chemicko-inženýrská, VŠCHT Praha, červen 2001.
3. Pavel Morávek: Řešení Ornsteinovy-Zernikeho rovnice pro model tuhých koulí s uzávěrem HNC pomocí matematické knihovny NITSOL. Studentská vědecká konference (*vedoucí S. Labík*), Fakulta chemicko-inženýrská, VŠCHT Praha, 23. 11. 2001.
4. Hana Gabrielová: Výpočet elementárních diagramů simulační metodou. Studentská vědecká konference (*vedoucí Al. Malijevský*), Fakulta chemicko-inženýrská, VŠCHT Praha, 23. 11. 2001.
5. Iva Odvárková: Determination of virial coefficients of heavier rare gases using accurate *ab initio* intermolecular potentials. Conference of PhD students (*vedoucí A. Malijevský*), Fakulta chemicko-inženýrská, VŠCHT Praha, prosinec 2001.

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2001

1. Structures and properties of hard sphere mixtures based on a self-consistent integral equation, L. L. Lee and A. Malijevský, *J. Chem. Phys.* 114, 7109 (2001).

Přednášky na konferencích za rok 2001

1. Towards fluid-fluid demixing in additive binary hard sphere mixtures, Thermodynamics 2001 (The 17th Thermodynamics Conference), M. Strnad and A. Malijevský, 4 - 6 April 2001, Bristol, UK.
2. Global phase diagrams of augmented van der Waals equation of state. Entropy driven phase separation for mixtures of hard spheres. 76th International Bunsen Discussion Meeting. Global Phase Diagrams. J. Bumba, J. Kolafa, A. Malijevský and J. Veverka, 19 - 22 August 2001, Walberberg, Germany.
3. Accurate estimates of higher virial coefficients of hard-sphere additive mixtures. 76th International Bunsen Discussion Meeting. Global Phase diagrams. A. Malijevský, J. Veverka, A. Ju. Vlasov and M. Strnad, 19 - 22 August 2001, Walberberg, Germany.
4. Fluid-fluid phase equilibria in hard-sphere binary mixtures. IUPAC 21st International Conference on Statistical Physics (Statphys 21). S. Labík, J. Kolafa, and A. Malijevský, 15 - 20 July 2001, Cancún, México.
5. An accurate bridge function of hard-sphere system by from computer simulation data. IUPAC 21st International Conference on Statistical Physics (Statphys 21). A. Malijevský, J. Veverka, and S. Labík, 15 - 20 July 2001, Cancún, México.
6. Určení struktury a termodynamických vlastností směsí tuhých dvouatomových molekul pomocí Ornsteinovy - Zernikeho integrální rovnice. 53. Zjazd chemických společností. S. Labík, T. Hujo, and Al. Malijevský, 3. - 6. September 2001, Banská Bystrica, Slovensko.
7. Monte Carlo Simulation of Hard Sphere Ternary Mixtures. 53. Zjazd chemických spoločností. Al. Malijevský and S. Labík, 3. - 6. September 2001, Banská Bystrica, Slovensko.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

8. State-of-the-art correlated *ab initio* potential energy curves for heavy rare gas dimers: argon, krypton and xenon. 53. Zjazd chemických společností. P. Slavíček, R. Kalus, P. Paška, I. Odvárková, P. Hobza, and A. Malijevský, 3. - 6. September 2001, Banská Bystrica, Slovensko.
9. Binary Additive Hard Sphere Mixtures - Entropically Driven Phase Separation and GPD. 53. Zjazd chemických společností. J. Bumba, J. Kolafa, A. Malijevský, and J. Veverka, 3. - 6. September 2001, Banská Bystrica, Slovensko.
10. Termodynamika a struktura systémů tuhých koulí. Termodynamika 2001. A. Malijevský, 13. - 14. 9. 2001, Brejlov.
11. Globální fázový diagram (GFD) - názorná pomůcka při studiu a zobrazování jevů ve fázovém chování. J. Bumba, 13. - 14. 9. 2001, Brejlov.
12. Teoretický popis termodynamických vlastností reálných tekutin. I. Odvárková, 13. - 14. 9. 2001, Brejlov.
13. Výpočty vlastností směsí molekulárních tekutin pomocí integrálních rovnic. S. Labík a R. Hujo, 13. - 14. 9. 2001, Brejlov.

Seznam ostatních prací za rok 2001 (nefinancovaných projektem)

1. Breviář z fyzikální chemie, VŠCHT Praha (A. Malijevský, vedoucí autorského kolektivu, S. Labík, člen kolektivu), 280 stran.
2. Fyzikální chemie II. VŠCHT Praha (A. Malijevský a S. Labík, členové autorského kolektivu), 319 stran.
3. Výpočet transportních vlastností u zemního plynu. J. Dědek, a. Malijevský, J. P. Novák, J. Oldřich, *Plyn*, 10, 2001.

Výuka na univerzitách (nefinancovaná z prostředků projektu)

1. *Fyzikální chemie I.*, A. Malijevský, semestrální přednáška pro studenty VŠCHT Praha
2. *Fyzikální chemie II.*, A. Malijevský, semestrální přednáška pro studenty VŠCHT Praha
3. *Fyzikální chemie III.*, S. Labík, semestrální přednáška pro studenty VŠCHT Praha
4. *Lekce ze statistické termodynamiky*, A. Malijevský, semestrální přednáška pro studenty specializace fyzikální chemie, FCHI, VŠCHT Praha
5. *Fyzikální chemie*, S. Labík, semestrální přednáška pro studenty bakalářských studijních programů, FPBT, VŠCHT Praha
6. *Statistická termodynamika*, A. Malijevský, semestrální přednáška pro studenty doktorských studijních programů.
7. *Programování v jazyce MAPLE*, S. Labík, semestrální přednáška pro studenty VŠCHT Praha.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Spolunositel 2: Fyzikální ústav AVČR

Zhodnocení:

Časově rozlišený terahertzový experiment aplikovaný na solvatační dynamiku může přinést informaci zejména o nelineární susceptibilitě 3. řádu zkoumaného systému, která je v našem případě spojena s pomalou (terahertzovou) dynamikou molekul rozpouštědla v okolí opticky excitovaných chromoforů.

Metodologie připravovaných experimentů nebyla dosud v literatuře zcela popsána a je obsahem vědeckých polemik. Řešení této části úkolu probíhalo zejména ve spolupráci se skupinou P. Jungwirtha z ÚFCH JH AVČR (společné semináře) a týkala se především určení optimálního sestavení experimentu a strategie numerických simulací, abychom byli schopni dostat porovnatelné a relevantní informace z teorie i experimentu (společný článek většího rozsahu je v přípravě).

Problém návrhu experimentu tkví zejména v krátkosti terahertzových pulsů vzhledem k jejich vlnové délce a také v tom, že délka THz pulsů může být srovnatelná s charakteristickou dobou solvatačních dějů. Navrhli jsme proto (viz připravovaný článek) dvě uspořádání, v nichž je možné získat celou dvoudimenzionální (v čase) nelineární susceptibilitu.

Postavili jsme terahertzové experimenty pro zesílené a nezesílené pulsy pro transmisní a emisní měření; experiment s optickým čerpáním se buduje. Z hlediska poměru signál/šum a z hlediska experimentální náročnosti a zkušeností se nám zdálo výhodné v první fázi testovat experiment na jiném modelovém systému — tenkých vrstvách ultrarychlých polovodičů (absorpce na volných nositelích náboje). Mimo jiné se podařilo zdokonalit detekční systém a tím zlepšit poměr signál / šum.

Provedli jsme rozsáhlou rešerši zajímavých materiálů vhodných pro experimentální studium metodou optické excitace – terahertzového sondování. Nejvhodnějším kandidátem optického chromoforu z hlediska všech kritérií se jeví kumarin.

Zahraniční cesty, stáže a pobyty

Senioři

Konference Infrared and Terahertz radiation: generation and applications, Rossendorf, Německo (18.1 – 20.1.2001) (*Filip Kadlec*)

26. International conference on infrared and millimeter waves, Toulouse, Francie (10.9. – 14.9.2001) (*Filip Kadlec*)

Vědecký pobyt, Univ. Paris-Nord, Francie (Únor-květen 2001) (*Petr Kužel*)

Studenti

26. International conference on infrared and millimeter waves, Toulouse, Francie (10.9. – 14.9.2001) (*Hynek Němec*)

10. International meeting on Ferroelectricity, Madrid, Španělsko (1.9. – 7.9.2001) (*Alexej Paškin*)

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2001

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

1. "Carrier dynamics in low-temperature grown GaAs studied by THz emission spectroscopy", Němec, H., Pashkin, A., Kužel, P., Khazan, M., Schnüll, S., and Wilke, I., *J. Appl. Phys.*, 90, 1303 (2001).

Seznam ostatních publikací za rok 2001

1. "THz transmission spectroscopy applied to dielectrics and microwave ceramics", Pashkin, A., Buixaderas, E., Kužel, P., Liang, M.-H., Hu, C.-T., and Lin, I.-N., *Ferroelectrics*, 254, 113 (2001).
2. "High frequency dielectric properties of $A_5B_4O_{15}$ microwave ceramics", Kamba, S., Petzelt, J., Buixaderas, E., Haubrich, D., Vaněk, P., Kužel, P., Jawahar, I. N., Mohanan, P., and Sebastian, M. T., *J. Appl. Phys.*, 89, 3900 (2001).
3. "Comparative study of hypersonic propagation in $YBa_2Cu_3O_{7-8}$ single crystals and thin films", Kužel, P., Dugautier, C., and Moch, P., *J. Phys. Condens. Matter*, **13**, 167 (2001).
4. "Polar phonons and central mode in antiferroelectric $PbZrO_3$ ceramics", Ostapchuk, T., Petzelt, J., Železný, V., Kamba, S., Bovtun, V., Porokhonsky, V., Pashkin, A., Kužel, P., Glinchuk, M. D., and Bykov, I. P., *J. Phys. Condens. Matter*, **13**, 2677 (2001).
5. "Dielectric properties of $Bi_2(Zn_{1/3}Nb_{2/3})_2O_7$ electroceramics and thin films.", Cheng, H.-F., Chen, Y.-C., Tsau, Y.-M., Kužel, P., Petzelt, J., Zhu, Y.-H., and Lin, I.-N., *J. Europ. Cer. Soc.*, **21**, 1605 (2001).

Přednášky na konferencích a universitách za rok 2001

1. Lectures on modern optics II, Petr Kužel cyklus přednášek na FZÚ AVČR (leden 2001)
2. "Study of carrier dynamics in LT GaAs via time resolved emission THz spectroscopy", P. Kužel, přednáška, Université Paris-Nord, Francie (21.5.2001)
3. "Carrier dynamics in low-temperature grown GaAs studied by THz emission spectroscopy", H. Němec, 26. International conference on infrared and millimeter waves, Toulouse, Francie (10.9. – 14.9.2001)
4. "Ultrafast spectroscopy in Center for complex molecular systems: current state and new developments", Filip Kadlec, přednáška FZÚ AVČR (20.4.2001)

Postery na konferencích za rok 2001

1. "Evaluation of data from optical pump – terahertz probe experiments using Fourier transformations", Němec H., Kadlec F., Kužel P., 26. International conference on infrared and millimeter waves, Toulouse, Francie (10.9. – 14.9.2001)
2. "Time-resolved and backward-wave oscillator submillimetre spectroscopy of some ferroelectric ceramics and thin films", Pashkin A., Kužel P., Petzelt J., Gorshunov B., Dressel M., 10. International meeting on Ferroelectricity, Madrid, Španělsko (1.9. – 7.9.2001)
3. "Infrared-active soft mode in $SrBi_2Ta_2O_9$ ", Kamba S., Moret M. P., Zallen R., Barber Z. H., Garg A., Kužel P., Petzelt J., 10th International Meeting of Ferroelectricity, Madrid, Španělsko (1.9. – 7.9.2001)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

4. "Terahertz and infrared spectroscopic study on dielectric properties of Bi(ZnNb)O for microwave application ", Cheng H., Chen Y., Liu H., Hwa L., Lin I., Kužel P., Petzelt J., 10-th International Meeting on Ferroelectricity, Madrid, Španělsko (1.9. – 7.9.2001)

Výuka na univerzitách

Electromagnétisme des milieux continus — optique, P. Kužel, semestrální přednáška, Université Paris-Nord, Francie (únor – květen 2001).

Popularizace vědy

Prezentace Centra (ultrarychlá a terahertzová spektroskopie) na dni otevřených dveří AVČR, 18. až 21. 10. 2001.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Spolunositel 3: Ústav Organické Chemie a Biochemie AV ČR

Zhodnocení:

Ve spolupráci s pracovištěm řešitele byl teoreticky i pokusně ověřen dvoustupňový mechanismus nepravé vodíkové vazby, která se tak zásadně liší od klasické jedностupňové vodíkové vazby.

Byly studovány interakce přechodných kovů s aminokyselinami a proteiny. Intenzivní úsilí věnováno studiu kooperativního efektu, který se ukazuje být možnou cestou k přesnému odhadu komplexační energie daného iontu kovu v obecném vazebném místě v metaloproteinu či peptidu.

Pomocí metod kvantové mechaniky (RI MP2) byly studovány interakce komplexu PBP-feromon s využitím strukturních dat z rentgenové difrakce.

Byly studovány inhibitory resistantních mutant HIV-1 proteázy. Byly provedeny počítačové simulace HIV-1 proteázy jako apoenzymu a její dynamické vlastnosti při otevírání aktivního místa.

Byla studována substrátová a inhibitorová specificita Cathepsinu podobných proteáz a návrh nových inhibitorů, jež byly syntetizovány na oddělení biochemie UOCHB.

Byly studovány fotofyzikální a fotochemické vlastnosti modelu paralelního dimeru benzenu.

U systému brommethylkarbenu byl teoreticky předpovězen a vysvětlen inverzní efekt těžkého atomu spin-orbitální interakce.

Byly odvozeny vztahy pro výpočet maticových prvků operátoru spin-spinové a spin-orbitální interakce v Breitově-Pauliho aproximaci mezi jednotlivými podhladinami spinově a/nebo orbitálně degenerovaných multipletů z maticových prvků těchto operátorů mezi elektronovými stavy s maximální hodnotou kvantového čísla projekce spinu do osy z, a to pro stavy s libovolnou spinovou multiplicitou molekul se sudým a lichým počtem elektronů. Byl naprogramován paralelní algoritmus výpočtu těchto maticových prvků pro vlnové funkce typu "Full CI".

Zahraniční cesty, stáže a pobyty

Senioři

Pracovní pobyt na University of Colorado, Boulder, USA, březen-duben 2001, výpočty a příprava publikace o inverzním efektu těžkého atomu.

37. Symposium teoretické chemie na téma: Struktura a dynamika elektronově excitovaných molekul, Bad Herrelalb, SRN, 23-27.9.2001.

(Zdeněk Havlas)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

9th International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, Spain, 10. - 14.9. 2001.

Pracovní pobyt u Doc. Ulf Rydeho na Universitě v Lundu, Švédsko, 29.10. - 31.10. 2001 (Lubomír Rulíšek)

Studenti

Pracovní pobyt ve skupině Strukturní biologie a Krystalografie Prof. Hilgenfelda, IMB, Jena, listopad 2001: Refinement krystalové struktury trojitě rezistentní mutanty HIV proteasy v komplexu s inhibitorem QF34. (Martin Lepšík)

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2001

1. Enhanced long-range Si...N interactions in organosilicon cations. A theoretical study. Z. Havlas, H. Bock, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 66, 473 (2001).
2. Interactions between allosteric modulators and 4-DAMP and other antagonists at muscarinic receptors: Potential significance of the distance between the N and carbonyl C atoms in the molecules of antagonists. M. Lysíková, Z. Havlas, S. Tuček, *Neurochem. Res.*, 26, 383 (2001).
3. Prediction of an inverse heavy-atom effect in H-C-CH₂Br: Bromine substituent as a π acceptor. Z. Havlas, J. Michl. *J. Am. Chem. Soc.*, 124, 0000 (2001).
4. Metodika kvantově-chemických výpočtů systémů obsahujících přechodné kovy, L. Rulíšek, *Chem. Listy* 95, 0000 (2001).
5. Computational and NMR study of multiple antigenic glycopeptides (MAGs) with Tn antigens. Sejbal J., Vondrasek J., Velek J., Veprek P., Trnka T., Jezek J. *Peptides 2000*, Martinez J. & Fehrentz J-A. Eds. EDK, Paris, France, 2001.
6. Magnesium and Biological Activity of Oxytocin Analogues Modified on Aromatic Ring of Amino Acid in Position 2. Slaninova J., Maletinska L., Vondrasek J., Prochazka Z. *J. Peptide Sci.* 7, 4113 (2001).
7. Strukturní a dynamická počítačová analýza vazby inhibitoru k protease viru HIV-1. M. Lepšík, *Chem. Listy* 95, 318 (2001).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Přednášky na konferencích a univerzitách za rok 2001

1. Teoretické studium nepravé vodíkové vazby, Z. Havlas, vědecká konference ÚOCHB AV ČR, 29. května 2001, Třešť.
2. Sto let kvantové mechaniky, Z. Havlas, výroční zasedání Učené společnosti ČR, 18. února 2001.
3. Quantum chemistry in the new milieu. Z. Havlas, Večerní přednáška pro účastníky Summer Academy, Studiumstiftung dDV, Praha, září 2001.
4. Dvoutýdenní přednášky na téma Quantum Physics and Quantum Chemistry, Z. Havlas, Studiumstiftung dDV, Praha, září 2001.
5. Teoretické studium interakcí přechodných kovů s aminokyselinami a proteiny, L. Rulíšek, obhajoba disertační práce, ÚOCHB AV ČR, 27. února 2001, Praha.
6. dtto, katedra chemické fyziky MFF UK, 27. března 2001, Praha.
7. dtto, v rámci přednáškového cyklu ÚMCH AV ČR, 24. května 2001, Praha.
8. dtto, vědecká konference ÚOCHB AV ČR, 29. května 2001, Třešť.
9. Spin-orbitální vazba a spin-spinová dipolární vazba v organických biradikálech, Mojmir Kývala, vědecká konference ÚOCHB AV ČR, 29. května 2001, Třešť.
10. Theoretical Studies of the Interactions of Transition Metals with Amino Acids and Proteins, L. Rulíšek, Lund University, 30. října 2001, Lund, Švédsko.
11. Molekulární modelování, přednáška v rámci postgraduálního kursu při UMG AV ČR, J. Vondrášek, Z. Havlas, listopad 2001.

Postery na konferencích za rok 2001

1. Inverse Heavy-Atom effect. Z. Havlas, 37. symposium teoretické chemie, Bad Herrenalb, SRN, září 2001.
2. Using DFT Methods for the Prediction of the Structure and Energetics of Metal-Binding Sites in Metalloproteins, L. Rulíšek, Z. Havlas, 9th International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, Spain, 10. - 14.9. 2001.
3. The HIV Protease database in a new milenium, J. Vondrasek, A. Wlodawer, VIth AIDS related systems meeting, Bethesda, 2001.

Organizace konferencí, letních a zimních škol

Tschechisch-deutsche Akademie IX Prag, Studienstiftung des deutschen Volkes, Arbeitsgrupe 1: Quantum Theory in Physics and Chemistry. Z. Havlas, J. Wess (Mnichov), 19. srpna – 1. září 2001.

Výuka na univerzitách

1. Bioinformatika, celosemestrální přednáška, katedra biochemie Přf UK, J. Vondrášek, 2001-2002.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Popularizace vědy

Příspěvek do programu ČT 1 “Letadlo” o klastrech atomů uhlíku, natočen na ÚOCHB, Z. Havlas, květen 2001.

Obhájené disertační práce

1. CSc.: Mojmír Kývala
2. CSc.: Lubomír Rulíšek
3. DrSc.: Zdeněk Havlas

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

2. Personální a organizační zabezpečení činnosti.

Nositel:

Počet pracovníků: 16, celkový úvazek 8.8

Podíl pracovní kapacity a věkové složení:

Pavel Hobza 55 let

Vladimír Špirko 59

Petr Nachtigall 38

Pavel Jungwirth 35

Jiří Šponer 37

Ota Bludský 37

Martin Hof 39

Jaroslav Vacek 32

Filip Lankaš 34

Dana Nachtigallová 37

Martin Kabeláč 30

Martina Roesselová 36

Vladimír Sychrovský 33

Filip Ryjáček 28

Bohdan Schneider

René Kalus 37

kapacita: všichni 70%

Zahraniční hosté (celkový úvazek 1.1)

Teresa Král (3 měsíce, úvazek 100%)

Virima Mudogo (2 měsíce, úvazek 100%)

Wiktor Zierkiewicz (2 měsíce, úvazek 100%)

Semen Trygubenko (3 měsíce, úvazek 100%)

Tetyana Bogdan (3 měsíce, úvazek 100%)

Studenti PhD (celkem 11)

Martin Šindelka 25

Markéta Davidová 25

Petr Slavíček 25

Jana Chocholoušová 24

David Řeha 25

Alexander Prokop 26

Martin Beneš 24

Petr Jurečka 25

Michal Hanus 26

Miloš Kalhous 25

Martin Šilhan 23

Studenti Mgr (celkem 6)

Eva Mrázková 21

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Tomáš Kubař 22
Martin Mucha 21
Aleš Benda 21
Jana Humpolíčková 21
Jaroslav Pekárek 21

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 30,9.

Průměrný věk kmenových pracovníků, PhD. studentů a diplomantů je 27,6.

Složení vědeckých pracovníků Centra se v roce 2001 podstatně nezměnilo. P. Jungwirth strávil tento rok na univerzitách v USA a Israeli (úvazek z Centra 0.5), Martin Kabeláč v UNIDO centru v Trieste, Itálie (úvazek z Centra 0.25) a Dana Nachtigallová byla na mateřské dovolené (úvazek z Centra 0.35). Nově přijatými pracovníky jsou Bohdan Schneider (úvazek z Centra 0.3) a René Kalus (úvazek z Centra 0.5). Filip Ryjáček přešel do kategorie seniorů PhD bude obhajovat v příštím roce. Od roku 2002 se vrací Martin Kabeláč a bude na plný úvazek pracovat v Centru.

V Centru na pracovišti nositele pracovalo v roce 2001 16 seniorů (celkový úvazek 8.8), 5 zahraničních pracovníků (celkový úvazek 1.1), 11 PhD studentů a 6 studentů.

Spolunositel 1:

Pracovní tým spoluřešitele I. byl v porovnání s minulým rokem opět rozšířen, aniž by byly požadovány jiné finanční prostředky, kromě původně plánovaných. Jeho současné složení je následující:

Prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc., spoluřešitel, věd. pracovník (58 let), Centrum: 0.7

Prof. Ing. Stanislav Labík, CSc. věd. pracovník (50 let), Centrum: 0.7

RNDr. Jiří Kolafa, CSc., věd. pracovník (41 let), Centrum: 0.7 (od listopadu 2001)

Ing. Jan Bumba, doktorand, (25 let), Centrum :0.5

Mgr. Alexandr Malijevský, doktorand (24 let), Centrum: 0.5

Ing. Iva Odvárková, doktorand (26 let), Centrum: 0.5

Ing. Jan Veverka, doktorand (23 let), Centrum: 0 (externí studium)

Pavel Morávek, diplomant (22 let), Centrum: 0.1

Hana Gabrielová, magisterský studijní program, 4. ročník (21 let), Centrum: 0 (od září 2001)

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 37,1.

Průměrný věk kmenových pracovníků, PhD. studentů a diplomantů je 29,3.

Celkem tedy tým spoluřešitele tvoří 3 mezinárodně zkušení odborníci (celkový úvazek 1.5), 4 studenti doktorských studijních programů (celkový úvazek 1.5) a 2 studenti magisterských studijních programů. Zájem ze strany studentů na práci v Centru je značný. Kvantitativně o něm hovoří systematický pokles průměrného věku týmu (v době podání návrhu 41 let, loni 30 let, letos 29,3 let). Další 2 studenti ze 3. ročníku mají zájem o práci a zúčastňují se pravidelných seminářů pořádaných jednou týdně. S jejich aktivní účastí však počítáme až v následujících letech.

Spolunositel 2:

Počet kmenových prac.:3

Petr Kužel 34

Filip Kadlec 30

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Santhi Surendran 37

PhD studenti: 2

Hynek Němec 22

Alexei Pashkin 25

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 28,3.

Všichni kmenoví pracovníci 70% (Celkový úvazek 2.1)

PhD studenti 100% (Celkový úvazek 0.7)

Spolunositel 3:

Počet kmenových prac. 4

Zdeněk Havlas 50 let

Mojmír Kývala 33

Lubomír Rulíšek 29

Jiří Vondrášek 38

PhD. studenti: 2

Martin Švec 27

Martin Lepšík 25

Diplomanti:

Vojtěch Klusák 23

Jakub Chalupský 22

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 31,7.

Průměrný věk kmenových pracovníků, PhD. studentů a diplomantů je 27,1.

Všichni kmenoví prac. 70% (Celkový úvazek 2.8)

PhD. studenti 100% (Celkový úvazek 2.0).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
 Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
 Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

3. Podrobná specifikace a zdůvodnění jednotlivých položek finančních prostředků projektu čerpaných v roce 2001²

Nositel:

1. Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)

investiční: 8 000

mzdové: 2 700

režijní: 5 460

Investiční prostředky:

Program pro paralelizaci kódu Gaussian98:	98
Diskové soubory pro pracovní stanici Compaq:	226
Klaster 21 počítačů Duál AMD (celkem 42 procesorů)	1 676
Kompaktní spektrofluorometr SPEX – Fluoromax 3 + příslušenství	1 507
Kompletní fluorescenční časově rozlišený systém IBH	3 000
Detekční modul pro mikroskop Confocor 1 Carl Zeiss, Jena	242
He-Ne laser pro mikroskop Confocor 1 Carl Zeiss, Jena	200
Nízkoteplotní termostat Julabo	70
Diodový laserový systém + počítačová karta pro časově rozlišená měření	943
Částečně notebook	38

Režijní prostředky:

Příspěvek na režii pracoviště (overhead)	936
Pojištění	945
Příspěvek ke stipendiím	780
Cestovné a konference	740
Software	180
Provoz a údržba počítačů a sítí	190
Chemikálie	170
Upgrade počítačů	100
Drobný majetek	650
Provozní náklady	769

Režijní prostředky byly použity podle plánu se dvěma výjimkami. Vedení ústavu trvalo na navýšení overheadu (z plánované částky 664 000 Kč na 936 000 Kč); po dohodě s MŠMT byla částka upravena bez nároků na úpravu režijních prostředků. Vzhledem k nutnosti dodatečných investic na nákup programu pro paralelizaci a disků pro pracovní stanici (které musely být hrazeny z investičních prostředků) jsme zvýšili částku na Drobný majetek a Upgrade počítačů celkově o 324 000 K.

Spolunositel 1: VŠCHT Praha

² Tato specifikace musí obsahovat podrobný rozpis (kalkulaci) a specifikaci všech finančních nákladů/výdajů projektu a celkové částky musí odpovídat hodnotám uváděným v "excelovské" tabulce (F1E), jejich zdůvodnění musí být ve vztahu k dílčím cílům projektu (komentář ke kalkulaci). Pokud došlo ke změnám ve specifikaci finančních položek oproti původnímu návrhu, je nutné je stručně charakterizovat ve vztahu ke smlouvě, zdůvodnit a uvést stanovisko zadavatele.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)

investiční: 1000
neinvestiční: 1 728
z toho mzdové: 768

investiční prostředky: Výpočetní klastr (pořízen UFCH, zapůjčen do VŠCHT): 1000
10 počítačů Duál PIII 1000 MHz, 1 GB RAM (celkem 20 procesorů) plus řídicí server.

neinvestiční prostředky:
sociální a zdravotní pojištění (35% mzdových prostředků): 269
drobný majetek a spotřební materiál: 295
Vědecké pobyty a konference: 396
Mzdy a odměny: 768

Prostředky byly čerpány v souladu s návrhem pro rok 2001.

Spolunositel 2: Fyzikální Ústav AV ČR

Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)

investiční: 0
neinvestiční: 1548
z toho mzdové: 570

investiční prostředky:
v roce 2001 nebyly požadovány

neinvestiční prostředky:
pojištění + FKSP: 210
příspěvek na režii FZÚ (overhead): 154
drobný majetek (optický a mechanický hardware) a spotřební materiál: 532
Vědecké pobyty a konference: 82
Mzdy a odměny: 570

Prostředky byly čerpány v souladu s návrhem pro rok 2001.

Spolunositel 3: Ústav Organické Chemie a Biochemie AVČR

Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)

investiční: 1000
neinvestiční: 1344
z toho mzdové: 936

Specifikace a zdůvodnění výdajových položek (v tisících Kč)

investiční prostředky:
Výpočetní klastr (pořízen UFCH, zapůjčen do ÚOCHB): 1000

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

10 počítačů Duál PIII 1000 MHz, 1 GB RAM (celkem 20 procesorů) plus řídicí server.

neinvestiční prostředky:

pojištění + FKSP: 307

příspěvek na režii ÚOCHB (overhead): 166

literatura, drobný majetek a spotřební materiál, technické zhodnocení: 835

Vědecké pobyty a konference: 36

Mzdy a odměny: 936

Prostředky byly čerpány v souladu s návrhem pro rok 2001.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

4. Přehled a upřesnění dílčích cílů projektu a postupu při jejich naplňování pro následující období, tj. pro r. 2002³

Nositel:

Bude studován mechanismus nepravé vodíkové vazby s cílem určit, kdy dochází ke vzniku klasické vodíkové vazby a kdy nepravé vodíkové vazby.

Bude studována interakce DNA s interkalátory, a to jak na úrovni základní (modelové) kvantověchemické studie, tak již i aplikační studie ineterkalace konkrétního interkalátoru do konkrétní DNA.

Budou vyšetřovány povrchy potenciální a volné energie komplexů, jakož i mikrohydratovaných komplexů. Studovány budou jak malé cyklické komplexy, tak i páry basí DNA.

Budou provedeny benchmarkové výpočty stabilizačních energií planárních a patrových párů basí nukleových kyselin. (*Pavel Hobza*)

Bude studována interakce malých molekul se systémy tranzitní kov-zeolit (například CO, NO, H₂O interakce s ionty mědi ve vysokosilikátových zeolitických maticích). Získaná data budou korelována s dostupnými experimentálními údaji za účelem interpretace experimentálních dat na atomární úrovni. (*Petr Nachtigall*)

Bude studována struktura a dynamika bází nukleových kyselin pomocí spekter nukleární magnetické resonance (NMR), konkrétně výpočtem spin – spinové štipicí konstanty. Srovnáním teoretických a experimentálních štipicích konstant budeme ověřovat strukturální parametry nukleových kyselin. (*Vladimír Sychrovský*)

Bude studováno chování molekulárních vrtulí na bázi karboránu v proudu vzácného plynu a v rotujícím elektrickém poli. (*Jaroslav Vacek*)

Bude analyzován vliv platinace na elektronovou strukturu guaninu, aciditu jeho vodíků, deprotonaci a energetiku párování.

Bude charakterizována struktura a rotace bází nukleových kyselin v jejich komplexech s cis a trans platinou.

Bude detailně studována interakce hydratovaných dvojmocných kovových iontů skupiny zinku a hořčíku s nukleotidy, včetně parametrizace polarizačního potenciálu pro zinek. Zvláštní pozornost bude věnována rozdílům v interakci s N7 dusíkem a anionickými kyslíky fosfátové skupiny (*Jiří Šponer*).

Bude prováděno počítačové modelování relaxace polárního rozpouštědla kolem excitovaného chromoforu v přímé návaznosti na femtosekundové experimenty.

Budou studovány atmosféricky relevantní jevy odehrávající se na rozhraní led-voda-vzduch, jako je chemie bromu a destrukce troposférického ozonu v přízemní polární troposféře nebo elektrické nabíjení ledových krystalků v bouřkových mracích.

³ Uvádí se bližší specifikace cílů stanovených smlouvou a jejich rozpis na dílčích cíle pro daný kalendářní rok, vč. časového harmonogramu

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Bude prováděno počítačové modelování zachycení reaktivních polutantů (ozon, OH radikál) na mikroaerosolech mořské soli.

Bude studováno chování atmosféricky relevantních molekulových iontů (SO₄²⁻, NO₃⁻) na kapalných aerosolech.

Bude studována vibrační a tunelová dynamika elektronu slabě vázaného ke komplexům v excitovaném "charge-transfer" stavu. (*Pavel Jungwirth*)

Studium vysoce excitovaných a kvazivázaných stavů molekulových útvarů (rozvíjení metodiky a aplikace).

Studium monomolekulárních reorganizací v modelových systémech, zejména přenosu protonu ve vodíkové vazbě (rozvíjení metodiky a aplikace). (*Ota Bludský, Vladimír Špirko*)

Bude dokončena analýza hydratačního obalu A formy DNA a RNA a krystalová struktura oktameru A-DNA. Bude zahájena analýza konformačního prostoru cukr-fosfátové páteře RNA (*Bohdan Schneider*).

Použití nové fluorescenční značky umožňuje excitaci diodovým laserem a studium pikosekundové dipolární relaxace v biologických membránách.

Nalezení optimálních podmínek pro studium kondenzace DNA pomocí fluorescenční korelační spektroskopie.

Kontrolovaný vznik fosfolipidových dvojvrstev charakterizovaný pomocí fluorescenční korelační spektroskopie a elipsometrie (*M. Hof*).

Spolunositel 1: VŠCHT

Bude studována můstková funkce, v závislosti na mezimolekulární vzdálenosti a hustotě, v jednodílném systému tuhých koulí

Bude navržena nová stavová rovnice kompatibilní s přesnými simulovanými daty pro systém tuhých koulí (*J. Kolafa, S. Labík, A. Malijevský*).

Budeme se zabývat výpočtem termodynamických vlastností a vnitřní struktury směsí tzv. molekulárních tekutin (*S. Labík, P. Morávek*).

Pomocí počítačových simulací budou studovány směsi tavenin (*J. Kolafa*).

Ve spolupráci s řešitelem a s "Ostravskou skupinou" budou simulovány a porovnány s experimentem makroskopické veličiny těžších vzácných plynů (*I. Odvárková, Al. Malijevský, P. Slaviček, P. Hobza, R. Kalus, P. Paška, A. Malijevský*).

Budou studovány globální fázové diagramy směsí z teoreticky podložených stavových rovnic navržených na našem pracovišti (*J. Bumba, J. Kolafa*).

Bude navržena nová metoda simulace chemických potenciálů složky modelových tříložkových směsí (*Al. Malijevský, S. Labík*).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Spolunositel 2: Fyzikální ústav AVČR

Bude dostavěn terahertzový experiment s optickým čerpáním, bude kladen důraz na optimalizaci detekčního systému pro zesílené pulsy: vysoký poměr signál šum je klíčový pro studium solvatační dynamiky, zejména chceme-li využít možnosti dvoudimenzionálního skenování v čase. Z metodických důvodů budou prováděny některé experimenty ještě na ultrarychlých polovodičových systémech. Postavený experiment však bude zejména aplikován na měření dynamiky susceptibility 3. řádu systému chromofor (kumarin) – rozpouštědlo. Srovnání s výsledky simulací by pak mělo umožnit získat informace o solvatační dynamice systému.

Spolunositel 3: Ústav Organické Chemie a Biochemie AV ČR

Budou navrženy peptidové sekvence pro selektivní interakce polutantních kovových iontů. Budou dokončeny programy pro výpočet relativistických efektů v organických biradikálech a programy budou použity k výpočtu spin-orbitálních vazeb a spin-spinových interakcí ve vybraných systémech.

Budou dokončeny studie UV spekter a fotoreaktivity u modelu paralelních benzenů.

Budou studovány interakce feromonů s PBP enzymy a navržené modifikace feromonů budou studovány experimentálně ve spolupráci s pracovišti ÚOCHB.

Bude studován problém sbalování proteinů na modelu retrovirálních proteáz. Experimentální část je řešena ve spolupráci s oddělením Biochemie, kde budou teoretické výsledky ověřeny.

Teoreticky i experimentálně budou studovány rezistentní mutanty proteazy viru HIV-1, s cílem objasnit ze strukturního hlediska příčiny vzniku rezistence a navrhnout způsoby, jak mu předcházet.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

5. Kalkulace předpokládaných celkových finančních výdajů projektu v r. 2002, vč. podrobné specifikace, jejich členění a zdůvodnění jednotlivých položek⁴

Nositel:

Investice: 0

Režie: 5 460

Mzdy: 2 700

Celkem: 8 220

Plánované režijní prostředky ve výši 5 460 tis. Kč použijeme v r. 2002 na krytí režie pracoviště (overhead ústavu 936 tis. Kč, pojištění 999 tis. Kč, příspěvek ke stipendiu studentů 780 tis. Kč, náklady na provoz a údržbu počítačů a sítí, pracovní cesty do zahraničí a na konference, software, upgrade výpočetní techniky, chemikálie, drobný a spotřební majetek).

V roce 2002 by se měl realizovat v našem Centru "sabbatical" pobyt prof Ch. Switzera z University of California at Riverside (3 měsíce); pobyt bude částečně hrazen Fulbrightovou nadací, Praha. Bude pokračovat spolupráce s Dr. T.Král z Polska (3 měsíce).

Očekáváme kratší pobyty studentů z Ukrajiny, Polska a Číny. Na plný úvazek v Centru nastoupí Martin Kabeláč.

Spolunositel 1:VŠCHT

Investice: 0

Neinvestice: 1728

Z toho mzdy: 768

Z toho režie: 960

Celkem: 1728

Režijní prostředky použijeme na pokrytí nákladů na pracovní cesty a mezinárodní vědecká setkání, nakup literatury, upgrade výpočetní techniky, běžný provoz a sociální a zdravotní zabezpečení.

Spolunositel 2: Fyzikální ústav AVČR:

Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)

investiční: 0

neinvestiční: 1548

z toho mzdové: 570

investiční prostředky:

v roce 2002 nejsou naplánovány

neinvestiční prostředky:

pojištění + FKSP: 210

příspěvek na režii FZÚ (overhead): 154

⁴ Tato specifikace musí obsahovat podrobný rozpis (kalkulaci) a specifikaci všech finančních nákladů/výdajů projektu a celkové částky musí odpovídat hodnotám uváděným v "excelovské" tabulce (F1E), jejich zdůvodnění musí být ve vztahu k dílčím cílům projektu (komentář ke kalkulaci).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

spotřební materiál, DHM, cestovné: 614
Mzdy a odměny: 570

Spolunositel 3: Ústav Organické Chemie a Biochemie AV ČR

investiční: 0
neinvestiční: 1344
z toho mzdové: 936

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.
Příjemce: Ústav fyzikální chemie JH, AV ČR

Tisková zpráva ⁵ (musí obsahovat dosažené cíle, resp. výsledky projektu – určeno pro závěrečnou zprávu do CEP):

(max. rozsah 254 znaků)

V Praze

dne:26. listopadu 2001

řešitel projektu
(podpis)

příjemce
(razítko a podpis statut .zást. příjemce)

⁵ Tisková zpráva je součástí pouze závěrečné zprávy a charakterizuje hlavní dosažené výsledky projektu, (záznamy o konkrétních výstupech projektu jako jsou publikace, výzkumné zprávy, patenty atd. příjemce zasílá každoročně do RIV!).