

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

---

## **Průběžná zpráva o realizaci projektu<sup>1</sup> v roce 2002**

### **1. Stručný přehled dílčích cílů projektu splněných v uplynulém období**

#### **Přehled splněných cílů a konkrétní využití výsledků (Centrum jako celek)**

Práce na projektu probíhaly úspěšně podle předloženého plánu a všechny stanovené úkoly byly splněny. Nedošlo k žádným změnám v projektu, ani k neočekávaným událostem, které by ovlivnily jeho plnění. Těžištěm činnosti Centra zůstává výchova a výuka studentů, vědecká činnost na mezinárodní úrovni a v neposlední řadě i popularizace vědy a styk s veřejností, zejména prostřednictvím sdělovacích prostředků. Odborné i široké veřejnosti slouží nově koncipovaná internetová stránka Centra [www.molecular.cz](http://www.molecular.cz), která kompletně informuje o vědeckých a pedagogických aktivitách Centra.

Kvalitu dosažených výsledků Centra v porovnání s Evropskou i světovou špičkou v oboru budeme v této zprávě konkrétně dokumentovat zejména publikačním výstupem, citačním ohlasem, řadou pozvání k proslovení přednášek na významných mezinárodních konferencích, jakož i narůstajícím mezinárodním charakterem Centra, který se projevuje obousměrným tokem studentů a vědeckých pracovníků (včetně hostujících profesorů) mezi Centrem a předními světovými pracovišti.

Důležitým faktorem při úspěšném plnění úkolů je i nadále velký zájem a nasazení ze strany českých i zahraničních studentů. Je velmi potěšitelné, že počet pre- i postgraduálních studentů v Centru se významně zvyšuje. Sklízíme tak plody naší aktivní činnosti zaměřené na vzbuzení zájmu ze strany studentů z celé republiky i zahraničí. 10 pracovníků Centra přednáší základní a pokročilé kurzy na UK (PřF a MFF), na UP (Universita Pardubice) a na VŠCHT. Pracovníci Centra vedou celkem 30 PhD. studentů a 11 diplomantů. Zcela převratnou formou zapojení Centra do vysokoškolské výuky je námi připravovaný nový magisterský a doktorský studijní program "Modelování bio- a nanostruktur", který plánujeme realizovat na PřF UK. Po úspěchu dvou škol pořádaných v loňském roce jsme letos zorganizovali 2. ročník letní školy teoretické a výpočetní chemie, jehož se zúčastnilo přes 20 studentů. Na základě dobrých zkušeností a intenzivního zájmu ze strany studentů jsme se rozhodli tuto akci pořádat pravidelně, každý druhý rok poslední týden v srpnu. Aby byla zajištěna vysoká kvalita této školy, zcela nově jsme z prostředků Centra vybavili počítačovou technikou moderní výukovou laboratoř, která bude využívána při výuce kvantové chemie a modelování.

Pro studenty Centra pořádáme pravidelné semináře, kde vystupují jak pozvaní renomovaní tuzemští i zahraniční vědci, tak naši studenti, kteří referují v anglickém jazyce o výsledcích své práce. Nutnou podmínkou k úspěšnému PhD. studiu v Centru je aktivní účast (poster nebo přednáška) studentů na mezinárodních konferencích a zahraniční stáž. Z prostředků Centra jsme vyslali 4 PhD. studenty na dlouhodobé stáže do USA, Koreje, SRN a Francie, jakož i 11 studentů na významné evropské konference. Recipročně, zahraniční studenti pracují v našem Centru, což dále přispívá k žádoucímu mezinárodnímu charakteru Centra.

---

<sup>1</sup> 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 zasílá v jednom vyhotovení zadavateli, (závěrečná zpráva se zasílá ve dvou vyhotoveních).

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

---

O mezinárodní prestiži Centra svědčí i skutečnost, že přitahuje k dlouhodobým pobytům jak zahraniční studenty a „postdoky“, tak i renomované hostující profesory. Našimi dlouhodobými hosty byli studenti z Izraele a Polska, „postdok“ ze Španělska a hostující profesor z University of California. Navíc dvě významné zahraniční univerzity (University of Pittsburgh a Goethe University Frankfurt) projevíly zájem o realizaci společného doktorského programu. Příslušná smlouva s University of Pittsburgh je již v závěrečné fázi schvalování a v únoru 2003 proběhne v Praze první společné symposium. Naše Centrum se také aktivně zapojilo do 6. rámcového programu EU podáním „Expression of Interest“. Centrum zde figuruje jako koordinátor „Network of Excellence – NABIOM“, jež sdružuje 27 pracovišť z 8 zemí EU a asociovaných zemí.

Výsledkem naší práce jsou především kvalitní publikace v renomovaných mezinárodních časopisech, jejichž počet proti loňskému roku dále vzrostl. V roce 2002 jsme publikovali celkem 36 původních prací v předních světových časopisech s vysokým impact factorem (např., Journal of American Chem. Society, J. of Physical Chemistry a J. of Chemical Physics) a dva zvané přehledné referáty, jeden v Journal of Physical Chemistry a druhý v Theoretical Chemical Accounts. Navíc je v současné době v tisku 31 článků, pocházejících z Centra. Všechny tyto publikace explicitně uvádějí v poděkování program center MŠMT. Kromě výše zmíněných prací bylo dále pracovníky Centra publikováno 6 dalších prací v recenzovaných mezinárodních časopisech. Kompletní seznam všech publikací Centra je uveden v Příloze I.

O výsledcích Centra je také pravidelně referováno na mezinárodních konferencích. Je potěšitelné, že naši pracovníci byli pozváni k přednesení plenárních přednášek na 6 prestižních konferencích, včetně Gordonovské konference, EURESCO a IUPAC konferencí. Kromě toho byla prezentována celá řada zvaných či krátkých ústních sdělení a posterů. Všechny konferenční příspěvky jsou jmenovitě uvedeny v Příloze I. Abychom dokumentovali podíl Centra na výchově mladých odborníků, uvedli jsme příspěvky studentů separátně. Je nepsaným pravidlem v Centru, že přijímáme každé pozvání na kvalitní konferenci, které je spojeno s proslovením plenární či zvané přednášky. Tato pozvání však v současné době již nejsou většinou spojena s plnou úhradou konferenčních nákladů. Díky prostředkům Centra se přesto takových konferencí můžeme zúčastňovat, což má zjevný přínos jak k propagaci výsledků Centra, tak i ke zkvalitnění a zvýšení mezinárodního charakteru našeho výzkumu.

Oproti loňskému roku citační ohlasy prací z Centra významně narůstají. Lze to dokumentovat např. studií otištěnou v zářijovém čísle Vesmíru a v Lidových novinách, podle které jsou mezi deseti nejvíce citovanými tuzemskými chemiky 4 pracovníci Centra (navíc vedoucí Centra je absolutně nejcitovanější zdejší chemik).

Těžištěm vědeckého projektu Centra je základní výzkum. V současné době proto nemáme přímé výstupy směrem k aplikační sféře. Vzhledem k charakteru naší činnosti však není vyloučené, že v budoucnosti by takové výstupy (např. v nano- a biomedicínských technologiích) mohly být realizovány.

V rámci popularizace vědy a styku s veřejností jsme realizovali následující aktivity. Vedoucí Centra vystoupil jako hlavní host v 30-ti minutovém televizním pořadu „Třetí k čaji“. Práce Centra byla prezentována v televizním pořadu „Vědník 9/02“. Zástupce vedoucího Centra vystoupil v 30-ti minutovém televizním diskusním pořadu o perspektivách české vědy. V Lidových novinách jsme se aktivně zapojili do diskuse o financování vědy v ČR. Ve Vesmíru jsme publikovali populárně vědecký článek o výsledcích Centra, jakož i

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

---

diskusní příspěvek o hodnocení vědců a vědecké práce. Aktivně jsme se podíleli na Dnech otevřených dveří AV ČR, které jsou zaměřeny zejména na středoškolskou mládež.

V Centru pracuje 26 vědeckých pracovníků (celkový úvazek 18.2), 4 zahraniční pracovníci (celkový úvazek 0.9), 30 studentů PhD a 11 diplomantů, kterým z prostředků Centra významně (podle výkonu až o 100 %) navyšujeme stipendium. Navíc, dva vědečtí pracovníci jsou krátkodobě plně financováni z prostředků Centra. Celkový průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 33.25 let, při zahrnutí i diplomantů se průměrný věk snížil na 29.4 let.

Byť Centrum v letošním roce nerealizovalo přímou investici, došlo k modernizaci hardware i software z režijních prostředků Centra. Konkrétně jsme provedli upgrade počítačového klastru zakoupením 6 duálních počítačů s nejrychlejšími procesory Athlon. Vzhledem k rostoucímu počtu studentů jsme také zvýšili počet koncových stanic (osobních počítačů) o šest a nově vybavili počítači výpočetní laboratoř. Průběžně také modernizujeme používané komerční programy. V současné době tedy máme k dispozici zřejmě největší počítačový klastr v ČR obsahující: 4-procesorový server Compaq Alpha ES-40 s 8 Gb paměti a 220 Gb diskového pole, 3x duální SGI Itanium s 18 Gb paměti a 120 Gb diskového pole a 100 procesorový moderní linuxový klastr. Celé toto výpočetní zařízení je spravováno pouze jedním zaměstnancem, kterému z Centra hradíme úvazek 0.6. Naše výpočetní kapacita je natolik uspokojující, že nemusíme, tak jako v minulosti, vyhledávat spolupráce se zahraničními partnery jenom proto, abychom mohli využít jejich hardware.

Závěrem úvodní části můžeme s potěšením konstatovat, že skvělé podmínky Centra nám umožnily realizovat všechny zamýšlené vědecké i pedagogické projekty. Významně se projevuje integrační charakter Centra. K řešení rozmanitých vědeckých problémů používáme v Centru společné metodiky. Vysoký stupeň integrace nám dovoluje realizovat takové projekty jako návrh nového magisterského a doktorského oboru, jakož i návrh realizace „Network of Excellence“ v rámci EU. Důležitým faktorem je, že vzhledem k existenci Centra jako velkého týmu s dlouhodobě zajištěným financováním, se pracovníci mohou soustředit na vědeckou a pedagogickou práci a administrativní činnost tak omezit na minimum. Práce publikované za rok 2002, Citační index za rok 2001, jakož i řada pozvání k proslovení plenárních přednášek na prestižních mezinárodních konferencích dle našeho názoru svědčí o vysoké kvalitě vědecké práce v Centru, která snese nejpřísnější mezinárodní srovnání.

### **Zhodnocení výsledků a plnění cílů projektu (jednotlivá pracoviště Centra):**

#### **Nositel: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR**

Teoreticky a experimentálně byl studován mechanismus nepravé vodíkové vazby a hledán obecný model molekulové interakce s participací vodíku.

Byly provedeny přesné výpočty stabilizačních energií modelových komplexů, jakož i planárních a patrových párů basí nukleových kyselin, kde celková stabilizační energie byla konstruována jako součet MP2 stabilizační energie určené v nekonečné bázi AO a rozdílu energií MP2 a CCSD(T) určené v menší bázi AO. Takto vypočtené stabilizační energie se liší od experimentálních dat o méně než 1 kcal/mol.

Byly studovány povrchy potenciální a volné energie komplexů karboxylových kyselin a bylo ukázáno, že cyklická struktura komplexu neodpovídá vždy globálnímu minimu.

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

---

Byla studována interakce DNA s interkalátory.  
Byl studován vliv platinace na elektronovou strukturu bazí nukleových kyselin.  
Byl proveden výpočet spin-spinové štěpící konstanty pro páry bazí nukleových kyselin.

Byl naprogramován nový počítačový kód ke studiu proudění kapalin a plynů přes nanostrukturované povrchy a povrch skla. Byly provedeny první simulace proudění vody po povrchu skla a byl navržen zcela nový postup ke snížení tření a odporu na površích.  
Je vyvíjen nový model chování molekulárních vrtulí a model tření molekulárních zařízení.

Při studiu struktury a dynamiky iontů na rozhraní voda-vzduch jsme přešli od atomárních iontů (halidové anionty) k atmosféricky relevantním molekulovým iontům, jako  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{HSO}_4^-$  a  $\text{NO}_3^-$ . Ukázali jsme, že sulfátový dianion je ve vodném prostředí vždy plně solvatován.

Zahájili jsme studium přenosu náboje při srážkách modelových ledových krystalků v bouřkových mracích.

Pokračují simulace relaxace polárního rozpouštědla kolem excitovaného chromoforu, v přímé návaznosti na časově rozlišené THz experimenty, prováděné v Centru.

Dokázali jsme existenci a popsali strukturu dipólově vázaných excitovaných stavů donor-akceptorových klastrových systémů, jako je  $\text{Cl}^- \dots \text{NH}_3$  a analogické systémy. Studujeme možný výtěžek, následující chemické reakce iniciované odtržením elektronu:  $\text{Cl}^- \dots \text{NH}_3 \rightarrow \text{HCl} + \text{NH}_2 + e^-$ .

Byl proveden první plně kvantově mechanický výpočet rychlostní konstanty pro formaci polyatomové molekuly radiativní asociaci. Výsledky poskytují korektní referenci pro testování aproximativní postupů, jež jsou použitelné pro popis radiativní asociace velkých molekulových útvarů v mezihvězdném prostoru.

Byla provedena analýza vibrační dimensionalit vodíkového můstku formimidolu. Byl konstruován plně dimensionální operátor kinetické energie jak pro tento modelový systém tak i pro strukturně podobný malonaldehyd. Výsledky otevírají možnost plně dimensionálního studia přenosu protonu v uvedených modelech.

Byly zahájeny práce na studiu anharmonicity biologicky významných pohybů v párech bazí DNA, vázaných vodíkovou vazbou.

Byla vypracována nová verze Rayleigh-Schrödingerovy poruchové teorie. Teorie, založená na lineární závislosti poruchových vlnových funkcí na poruchových energiích, je vhodná pro výpočty vysoce excitovaných a kvazivázaných stavů.

Bylo provedeno navržení, vyvinutí a spektroskopická charakterizace nové fluorescenční značky do biomembrán s unikátními vlastnostmi, jakož i vytvoření nové metody pro přesnou charakterizaci laterální difúze lipidů.

Byla studována interakce malých molekul ( $\text{CO}$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ) s kationty tranzitních kovů v zeolitických maticích pomocí kombinované kvantově mechanické-molekulově mechanické metody. Na základě našich výpočtů byla navržena interpretace experimentálních dat na

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

---

atomární úrovni. Byla zjištěna korelace mezi strukturou, a spektroskopickými charakteristikami studovaných systémů.

### **Zahraniční cesty, stáže a pobyty**

#### **Vědečtí pracovníci**

1. Přednáškový pobyt v Kalifornii, USA (3. – 21.8.2002) , Pavel Hobza
2. EURESCO konference “ Molecules of Biological Interests in the Gas Phase“, Kreuth, SRN (21. – 26.7.2002) , Pavel Hobza
3. Přednáškový pobyt v Kanadě (19. – 27.3.2002) , Pavel Hobza
4. Konference “Chemistry towards Biology“, Portorož, Slovinsko (8. – 12.9. 2002), Pavel Hobza
5. EURESCO konference “ Molecules of Biological Interests in the Gas Phase“, Kreuth, SRN (21. – 26.7.2002), Martin Kabeláč
6. 16<sup>th</sup> European Experimental Nuclear Magnetic Resonance (EENC) konference, Praha, (9. – 14. 6. 2002), Vladimír Sychrovský
7. 6<sup>th</sup> World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC) konference, Lugano, Switzerland, (4.-9. 8. 2002), Vladimír Sychrovský
8. 6<sup>th</sup> World Congress of Theoretically Oriented Chemists (WATOC) konference, Lugano, Switzerland, (4.-9. 8. 2002), Jaroslav Vacek
9. EURESCO konference “ Supramolecular Chemistry: Molecular rods switches and Aires“, San Feliu de Guixols, Spain, 14. 9. - 19. 9. 2002, Jaroslav Vacek
10. Studijní pobyt u Prof. Josefa Michla, Boulder, CO, USA, duben, květen 2002, Jaroslav Vacek
11. DURINT Grant meeting, Boulder, CO, USA, 9. 5. 2002, Jaroslav Vacek
12. Hostující profesor na Hebrew University, Jerusalem, Israel, leden 2002, Pavel Jungwirth
13. XIII Symposium on atomic and surface physics and related topics, Going, Austria, 17. - 23. 2. 2002, Pavel Jungwirth
14. Telluride symposium on doped rare gas clusters, Telluride, USA, 24. - 30. 6. 2002, Pavel Jungwirth
15. Quantum dynamical concepts: From diatomics to biomolecules. International conference and school. Dresden, Germany, 2. 4. - 3. 5. 2002, Pavel Jungwirth.
16. 4th international conference on low temperature chemistry, Keuruu, Finland, 3. - 8. 8. 2002, Pavel Jungwirth.
17. Molec XIV - European conference on dynamics of molecular collisions, Istanbul, Turkey, 1. - 6. 9. 2002, Pavel Jungwirth
18. Hostující profesor na Jackson State University, Jackson, USA, duben-květen 2002, Vladimír Špirko
19. Hostující profesor na MPA für Astrophysik, Garching, Německo, červen-červenec 2002, Vladimír Špirko
20. Niels Bohr Institute for Astronomy, Physics and Geophysics, Copenhagen, srpen 2002, Ota Bludský
21. W. Mejbbaum-Katzenellenbogen's Molecular Biology Seminars, Wroclaw, Poland (26-29.5.2002), Martin Hof
22. Přednáškový pobyt, University Maastricht, CARIM, The Netherlands (6.4-14.4.2002), Martin Hof

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

---

23. Přednáškový pobyt, University Strasbourg, Faculty of Pharmacy, France (3.10-11.10.2002), Martin Hof
24. Konference "British Zeolite Association Meeting 2002", Heriot-Watt Conference Centre, Edinburgh, Skotsko (4.-9. 8. 2002), Petr Nachtigall
25. Konference "2nd FEZA Conference", Taormina, Naxos, Italy (1. – 5. 9. 2002), Petr Nachtigall
26. Konference "Zeolite Discussion Meeting", Wysowa Zdrój, Polsko, (22. – 26. 9. 2002), Petr Nachtigall

### **Studenti**

1. EURESCO konference "Molecules of Biological Interests" in the Gas Phase", Kreuth, SRN (21. – 26.7.2002), Jana Chocholoušová, Petr Jurečka
2. J.W.Goethe University, Frankfurt a. M. , SRN (7.-11.10 2002), Tomáš Kubař, Eva Mrázková
3. EURO WINTERSCHOOL "Quantum Simulations of Complex Many – Body Systems: From Theory to Algorithms", Rolduc Conference Centre, The Netherlands (25.2-1.3. 2002), Jana Chocholoušová
4. Penn State University, USA (18.4.-2.6.2002), Jana Chocholoušová
5. Training course on Molecular Design and Computer Assisted Combinatorial Chemistry, Trieste, Itálie (8.-12.7.2002), David Řeha, Alexandr Prokop
6. Quantum dynamical concepts: From diatomics to biomolecules. International conference and school. Dresden, Germany, 2. 4. - 3. 5. 2002, Petr Slavíček, Martina Roeselová, Martin Mucha, Milan Šindelka.
7. The 2002 conference of younger European chemists, Heidelberg, Germany, 30. 9. - 2. 10. 2002, Petr Slavíček.
8. Studijní pobyt na MPA für Astrophysik, červen-červenec 2002, Milan Šindelka
9. Studijní pobyt na University of Pittsburg, září-listopad 2002, Milan Šindelka
10. Konference "Zeolite Discussion Meeting", Wysowa Zdrój, Polsko, (22. – 26. 9. 2002), Jan Kučera
11. EURESCO konference "Zeolite Molecular Sieves" , Obernai (near Strasbourg), France, (15. – 20.3.2002), Jan Kučera, Markéta Davidová
12. Pohang University, Korea (1. 10.-15. 12. 2002), Petr Jurečka

### **Organizace konferencí, letních a zimních škol**

#### **Letní škola Teoretické a výpočetní chemie**

V době od 26. do 30. srpna 2002 jsme uspořádali v prostorách ÚFCH JH "2. Letní školu teoretické a výpočetní chemie". Akce se setkala s velkým zájmem studentů (a to jak doktorandů, tak i studentů magisterského studia) prakticky ze všech českých univerzit majících chemickou fakultu. Na přednáškách pro 20 registrovaných studentů se podíleli členové tří pracovišť Centra: Bludský, Hobza, Jungwirth, Nachtigall, Ryjáček a Vacek z ÚFCH, Malijevski z VŠCHT a Havlas z ÚOChB. Důležitou součástí letní školy byla

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

---

praktická cvičení na počítačích v nově zrekonstruované počítačové laboratoři, která vedli doktorandi z Centra.

### **Mezinárodní konference a škola Quantum dynamical concepts: From diatomics to biomolecules.**

Od 2. 4. do 3. 5. 2002 zástupce vedoucího Centra spolupořádal v Drážďanech 4týdenní školu a týdenní mezinárodní konferenci *Quantum dynamical concepts: From diatomics to biomolecules*. Školy a konference se aktivně zúčastnili také 4 PhD. studenti z Centra.

### **Mezinárodní konference The 17th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Praha, 1.9.-5.9. 2002.**

Na organizování konference se podíleli dva pracovníci Centra: O.Bludský, V.Špirko a jeden doktorand (M.Šindelka).

### **Hosté Centra**

1. Prof. C. Switzer, University of California, Riverside, USA.
2. Dr. O. Dopfer, University of Basel, Switzerland.
3. Prof. C. Sandorfy, University of Montreal, Canada.
4. Prof. K. Kleinermanns, University of Dusseldorf, Germany.
5. Prof. M. Lewerenz, University M. and P. Curie, Paris, France.
6. Dr. B. Schmidt, Free University, Berlin, Germany.
7. W. Zierkiewicz, University of Wroclaw, Poland.
8. Dr. W.P.Kraemer, MPI für Astrophysik, Germany
9. Dr. F.Mrugala, University of Torun, Poland
10. Dr. A. Skalozub, University of Dnepropetrovsk, Ukraine
11. Prof. D. Birch, University of Glasgow, United Kingdom
12. Prof. D. Jameson, University Hawaii, USA
13. Prof. C. Steinem, University Regensburg, Germany
14. Prof. J. Sauer, Humboldt University, Germany

### **Výuka na univerzitách**

1. *Computational atmospheric chemistry*, Pavel Jungwirth, semestrální přednáška pro studenty, Hebrew University of Jerusalem.
2. *Klasická a kvantová molekulová dynamika*, Pavel Jungwirth, 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, FJFI CVUT, Praha, letní semestr
6. *Teoretická a výpočetní chemie*, Pavel Hobza, semestrální přednáška pro studenty, PřF UK Praha.

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

---

7. *Úvod do kvantové chemie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, zimní semestr.
8. *Kvantová chemie - spektroskopie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, zimní semestr.
9. *Metody kvantové chemie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, letní semestr.
10. *Kvantově chemické aplikace*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, letní semestr.
11. *Počítačové simulace biomakromolekul*, Jaroslav Vacek MFF UK, BCM 302, zimní semestr
12. *Fluorescence spectroscopy: principles and biological applications*, Martin Hof, FJFI CVUT, Praha, zimní semestr

### **Popularizace vědy**

Vystoupení jako hlavní host v 30-ti minutovém televizním pořadu "Třetí k čaji" (P. Hobza).  
Prezentace vědeckých výsledků Centra v televizním pořadu "Vědník 09/2002" (J. Vacek).  
Vystoupení v 30-ti minutovém televizním diskuzním pořadu o perspektivách české vědy (P. Jungwirth).

Příspěvek a titulní strana do květnového čísla časopisu Vesmír věnovaného nanotechnologiím (J. Vacek).

Prezentace Centra na dni otevřených dveří AV ČR, 19. a 20. 10. 2002, pořad o DNA a nanotechnologiích a prezentace 3D brýlí a molekul ve virtuální realitě.

### **Ocenění**

Prémie Otty Wichterleho (*Pavel Jungwirth*)

Prémie Otty Wichterleho (*Petr Nachtigall*)

Cena v oboru katalýzy za rok 2002 Odborné skupiny katalýza České společnosti chemické, Jan Kučera, práce "Theoretical investigation of the coordination of alkali ions in MFI and an interaction with pyrrol as a probe molecule"

Uznání Odborné skupiny katalýza České společnosti chemické, Martin Šilhan, práce "Theoretical study of  $\text{Ag}^+/\text{MFI}$  and its interaction with NO and CO"

### **Spolunositel 1: VŠCHT**

V souladu s plánem prací byly v řešeny následující úlohy:

Studium můstkové funkce.

Můstková funkce je fundamentální veličinou, jejíž znalost dovoluje, v rámci teorií integrálních rovnic, popis vnitřní struktury a termodynamiky tekutin a jejich směsí. Přes tuto důležitost nebyla můstková funkce kvantitativně známa ani pro nejjednodušší modelové systémy. Po zhruba čtyřletém bádání se nám podařilo můstkovou funkci získat inverzí velmi přesných dat simulovaných metodami Monte Carlo a molekulová dynamika. Rozhodující roli přitom hrál klastř počítačů, zakoupený z prostředků Centra, bez něhož bychom nemohli na řešení uvedené, numericky velmi náročné, metody ani pomýšlet. Výsledky jsou shrnuty v



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

---

rozsáhlém článku v časopise *Molecular Physics*.

Studium můstkové funkce je "během na dlouhé vzdálenosti": Letos jsme navrhli originální metodu výpočtu elementárních diagramů, koeficientů Taylorova rozvoje můstkové funkce v hustotě. Článek je v tisku. Dalším krokem je parametrizace získané můstkové funkce jako funkce hustoty a mezičásticové vzdálenosti. Některé předběžné práce probíhají již letos, výsledky však lze očekávat až v příštím roce. Práci na můstkové funkci považujeme za "highlight" našeho pracoviště.

- Vlastnosti makroskopických systémů z prvních principů

Přesný výpočet termodynamických veličin z "čisté teorie", tj. bez jakýchkoliv nastavitelných konstant, je jednou z velkých výzev pro teoretické chemiky. V rámci Centra byly provedeny vysoce přesné *ab initio* výpočty (Petr Slavíček, pracoviště řešitele) párových mezimolekulárních potenciálů těžkých vzácných plynů a ověřeny na experimentálních rotačně-vibračních spektrech a druhých viriálních koeficientech (spoluřešitel 1). Práce je v recenzním řízení v časopise *The Journal of Chemical Physics*.

Dalším krokem je simulace termodynamických veličin pomocí získaných potenciálů. Předběžné výsledky byly prezentovány na mezinárodní konferenci, článek pro *The Journal of Molecular Liquids* je v přípravě. V příštím roce hodláme problematiku rozšířit o *ab initio* výpočty tříčásticových mezimolekulárních potenciálů, o jejich ověření na datech o rotačně-vibračních spektrech a na datech o třetích viriálních koeficientech. Následně plánujeme simulace vlastností hustých tekutin.

- Globální fázové diagramy.

Studium globálních fázových diagramů patří mezi moderní, rychle se rozvíjející, směry fenomenologické termodynamiky. Na našem pracovišti byl vyvinut originální program, který je k dispozici světové odborné veřejnosti.

Pomocí výše uvedeného programu byl vypočten fázový diagram pro BMCSL-Dietericiho stavovou rovnici. Výsledky byly prezentovány na mezinárodní konferenci a budou předloženy k publikaci.

- Simulace chemických potenciálů

Naše původní metoda simulace chemických potenciálů (SP-MC) se započtením teoretických vazných podmínek byla rozšířena na tříložkové soustavy. Výsledky byly prezentovány na mezinárodní konferenci, článek je v přípravě.

- Vnitřní struktura a termodynamické vlastnosti vícesložkových směsí

Byly porovnány předpovědi teorie RFA a teorií integrálních rovnic s našimi novými simulovanými daty. Výsledky byly prezentovány na mezinárodních konferencích. Článek v časopise *Physical Review E* je v tisku.

- Dodatkové objemy směsí

Byl vytvořen nový efektivní a robustní program na řešení Ornsteinovy-Zernikeho rovnice pro směsi molekulárních tekutin; je k dispozici odborné vědecké komunitě na požádání. Pomocí tohoto programu byly vypočteny dodatkové objemy směsí. Ty byly porovnány s výsledky plynoucími z publikovaných stavových rovnic. Překvapivě se výsledky obou přístupů liší i ve znaménku dodatkových objemů (!). "Rozhodčím" mohou být jen velmi přesné počítačové

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

---

simulace, které plánujeme v příštím roce. Letos byla tato problematika předmětem diplomové práce a byla dále prezentována na mezinárodní konferenci. S publikací počítáme až po provedení simulací.

Vedle výše uvedených plánovaných výzkumných okruhů, jsme začali pracovat na dvou nových:

- Molekulová dynamika potenciálových modelů s polarizovatelností  
Polarizovatelnost (indukované dipolové momenty) hraje klíčovou roli při realistických simulacích kapalné vody a jiných polárních tekutin, tavenin elektrolytů a směsí vody a iontů. Letos byla této problematice věnována diplomová práce. Výsledky byly rovněž prezentovány na mezinárodní konferenci a předloženy k publikaci v *The Journal of Molecular Liquids* .
- Density Functional Theory a Fundamental Measure Theory  
Uvedené rychle se rozvíjející teorie dovolují výpočty vnitřní struktury homogenních tekutin, kde konkurují metodám integrálních rovnic, predikce fázových přechodů tekutina - krystal, tekutina - tekutina, atd., a predikcím vlastností nehomogenních tekutin, tj. tekutin v interakci s póry různé geometrie. Práce na tomto tématu nebyla do plánu na příští rok zahrnuta. Ve spolupráci se zahraničními partnery (Universita Halle, SRN a Universita Lublin, Polsko) se však začala zdárně rozvíjet. Výstupy plánujeme na příští rok.

### **Zahraníční cesty, stáže a pobyty**

#### **Vědečtí pracovníci**

5<sup>th</sup> Liquid matter Conference of the European Physical Society, Konstanz, SRN (13. 9. 2002 - 19. 9. 2002), Anatol Malijevský

#### **Studenti**

1. Studijní pobyt, Universität Halle, SRN, 16. 4. - 26. 4. 2002, Alexandr Malijevský
2. Studijní pobyt v rámci projektu SOCRATES/ERASMUS (pobyt nehrazen z prostředků Centra), Instituto Superior Técnico, Lisabon, Portugalsko, 15.3. - 9. 9. 2002, Jan Bumba .
3. Studijní pobyt v rámci projektu SOCRATES/ERASMUS (pobyt nehrazen z prostředků Centra), Instituto Superior Técnico, Lisabon, Portugalsko, 15.3. - 9. 9. 2002, Iva Odvárková.
4. Studijní pobyt, University Marie Curie Sklodowski, Lublin, Polsko, 15. 10. - 25. 10. 2002, Alexandr Malijevský

### **Výuka na univerzitách (nefinancovaná z prostředků Centra)**

1. A. Malijevský: Fyzikální chemie I. základní kurz pro studenty magisterských studijních programů, VŠCHT Praha
2. A. Malijevský: Fyzikální chemie II. základní kurz pro studenty magisterských studijních programů, VŠCHT Praha
3. A. Malijevský: Statistická termodynamika, pro studenty specializace fyzikální chemie magisterských studijních programů, VŠCHT Praha

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

---

4. A. Malijevský: Statistická termodynamika, pro studenty doktorských studijních programů.
5. S. Labík: Fyzikální chemie III. pro studenty VŠCHT Praha
6. S. Labík: Fyzikální a koloidní chemie základní kurz pro studenty bakalářských studijních programů VŠCHT Praha
7. S. Labík: Programování v jazyce Maple pro studenty VŠCHT Praha
8. J. Kolafa: Seminář z fyzikální chemie I. pro studenty magisterských studijních programů VŠCHT Praha
9. J. Kolafa: Seminář z fyzikální chemie II. pro studenty magisterských studijních programů VŠCHT Praha
10. J. Kolafa: Seminář ze statistické termodynamiky, pro studenty specializace fyzikální chemie magisterských studijních programů VŠCHT Praha
11. J. Kolafa: Seminář ze statistické termodynamiky pro studenty doktorských studijních programů.
12. J. Kolafa: Počítačové simulace pro studenty magisterských a doktorských studijních programů.
13. A. Malijevský: Seminář předmětu počítačové simulace pro studenty magisterských a doktorských studijních programů.

### **Organizace konferencí**

6<sup>th</sup> Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids

Na organizaci této prestižní mezinárodní konference se podílel pracovník Centra J. Kolafa a studenti Centra.

### **Popularizace vědy**

1. J. Kolafa: SIMOLANT 2002. Program na ukázkou skupenských přeměn a výuku molekulových simulací. Program je vhodný pro výuku fyziky a chemie na základní a střední škole a pro univerzitní kurz počítačových simulací. Předvedeno na VŠCHT Praha.
2. A. Malijevský: Energie kontra entropie. Přednáška pro studenty Masarykovy střední školy chemické.

### **Hosté centra:**

Prof. Dr. J. Winkelmann, Universität Halle, SRN, 1 týden, listopad 2002.

### **Samostatné studentské práce:**

1. Pavel Morávek: Řešení Ornsteinovy- Zernikeho rovnice pro směsi molekulárních tekutin, Diplomová práce (vedoucí S. Labík), VŠCHT Praha, červen 2002.
2. Jiří Genzer: Numerical integration of equations of motion with a self-consistent field, Diplomová práce (vedoucí J. Kolafa), MFF UK, Praha červen 2002.
3. M. Francová: Příspěvek ke korelaci můstkové funkce, studentská vědecká konference (vedoucí A. Malijevský a S. Labík), 29. 11. 2002, 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 AV ČR**

Vypracovali jsme v plné obecnosti teorii dosud nevyřešeného teoretického problému šíření ultrakrátkých terahertzových (THz) pulsů v nerovnovážném (fotoexcitovaném) prostředí a navrhli z toho vyplývající metodiku experimentu typu optická excitace – terahertzové sondování a dekonvoluce experimentálních dat. Výsledky lze aplikovat na studium dynamiky nositelů v polovodičích, na studium solvatační dynamiky a na rychlé konformační relaxace biomolekul. Nerovnovážná 2D susceptibilita, kterou lze z experimentu získat zcela popisuje nerovnovážnou ultrarychlou dynamiku a může v principu poskytnout více informací než klasické časově-rozlišené optické metody.

Bylo navrženo, sestaveno a uvedeno do provozu elektronické řízení směru laserového svazku. Tím se nejméně o řád zlepšila jeho prostorová stabilita, což má značný význam pro přesnost měřených dat při delších experimentech.

Po důkladném studiu bibliografie, proměření rovnovážných vlastností řady roztoků a srovnání s podmínkami vyplývajícími z naší teorie jsme ke studiu dynamiky solvatace zvolili systém kumarin 153 – chloroform. Připravili jsme experiment s průtokovou celou, aby se dostávaly do měřeného objemu, při opakovací frekvenci laseru 1 kHz, stále čerstvé molekuly. Vzhledem k agresivitě rozpouštědla a nutnosti splnění několika částečně protichůdných kritérií (kompaktnost, výkon, omezení zbytkového tepla, chemická kompatibilita) se nejednalo o triviální úkol. Vlastní experimenty jsou všestranně náročné, v současné době probíhají.

Provedli jsme časově rozlišená měření fotoexcitovaného GaAs a InP v závislosti na intenzitě optické excitace (tj. experiment ve stejném uspořádání jaké je aplikováno na měření solvatační dynamiky a které vychází z naší teorie); změřená dynamika poskytuje velmi mnoho informací o důležitých, ale jinak obtížně dostupných veličinách (charakteristiky rozptylu volných elektronů a děr, rychlost šíření excitovaného rozhraní, nelineární koeficienty, superfluorescence). Dvě významné publikace jsou v přípravě.

### **Zahraniční cesty, stáže a pobyty**

#### **Vědečtí pracovníci**

1. Hostující profesor na Universitě Paris-XIII, Francie, květen 2002, Petr Kužel
2. Université de Savoie, Chambéry, Francie, 3.-7.1. 2002, Petr Kužel, Filip Kadlec
3. 27-th conference on Infrared and millimeter waves, San Diego, USA, 22.9.-26.9 2002, Filip Kadlec
4. Konference THz-Bridge Workshop, Capri, Itálie, 29.9.-2.10. 2002, Petr Kužel, Christelle Kadlec

#### **Studenti**

1. Konference ECAPD-6, Aveiro, Portugalsko, 2.9.-5.9.2002, Alexej Paškin
2. DPG-Schule für Physik, Kurs I: Optimal Femtosecond Laser Control of Microscopic Dynamics, Physikzentrum, Bad Honnef, Německo, 22.-27.9. 2002, Hynek Němec

### **Popularizace vědy**

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

---

Prezentace Centra (ultrarychlá a terahertzová spektroskopie) na dni otevřených dveří AVČR, 19. až 22. 10. 2002.

Účast v projektu Tváře české vědy (P. Kužel), [www.tvarevedy.cz](http://www.tvarevedy.cz), rozhovor v časopisu VTM

Přednáška Interakce světla s hmotou, Gymnázium v Kladně (P. Kužel)

Byly zprovozněny webové stránky Laboratoře terahertzové spektroskopie (včetně informací pro studenty o možných tématech):

[http://www.fzu.cz/departments/dielectrics/groups/lts/LTS\\_cz.pdf](http://www.fzu.cz/departments/dielectrics/groups/lts/LTS_cz.pdf)

### **Spolunositel 3: Ústav Organické Chemie a Biochemie AV ČR**

Na ÚOCHB centrum pravidelně dvoutýdenně pořádá semináře vedené v anglickém jazyce, přednášejí jak pracovníci centra včetně studentů, tak zvaní hosté. Centrum přijalo jako zástup za Dr. Ruliška, který je na dlouhodobé stáži ve Švédsku, Dr. Svozila, který se zapojil do činnosti centra v oblasti návrhu silového pole pro studium interakcí mezi biomolekulami a nepolárními ligandy, kde současná teorie selhává. Diplomant Klusák obhájil a pokračuje v Centru jako doktorand. Získali jsme do Centra novou diplomantku Bendovou, s kterou počítáme na příští rok jako s doktorandkou pro oblast studia interakcí biomolekul.

Byly dokončeny teoretické studie interakcí peptidů s přechodnými kovy, navržen a naprogramován postup výběru peptidové sekvence s vysokou specificitou k vybraným přechodným kovům a navrženy první peptidové sekvence pro selektivní interakce ionty rtuti, které jsou v současné době (úspěšně) testovány expresí do bakterií a rostlin.

Byly dokončeny programy pro výpočet relativistických efektů v organických biradikálech a programy jsou používány k výpočtu spin-orbitálních vazeb a spin-spinových interakcí ve vybraných systémech.

Pokračují studie UV spekter a fotoreaktivity u modelu paralelních benzenů.

Byly studovány interakce feromonu bombykolu s PBP enzymem a vzhledem k objeveným typům interakcí se připravuje nová metodika studia interakce navržených modifikací feromonů s PBP.

Je 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 jsou studovány rezistentní mutanty proteázy 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

---

**Zahraníční cesty, stáže a pobyty**  
**Vědečtí pracovníci**

1. Pracovní pobyt u Prof. J. Michla, Boulder, CO, USA, září 2002, Zdenek Havlas

**Výuka na univerzitách**

J. Vondrášek, Bioinformatika, Celosemestrální přednáška, katedra Biochemie, PřF UK Praha

**Popularizace vědy**

Rozhovory s redaktory medií o vědeckých výsledcích ÚOCHB (a z toho plynoucí články).

**2. Personální a organizační zabezpečení činnosti.**

**Nositel:**

Počet pracovníků: 15, celkový úvazek 10.5

Podíl pracovní kapacity a věkové složení:

Pavel Hobza 56 let

Vladimír Špirko 60

Petr Nachtigall 39

Pavel Jungwirth 36

Jiří Šponer 38

Ota Bludský 38

Martin Hof 40

Jaroslav Vacek 33

Filip Lankaš 35

Dana Nachtigallová 38

Martin Kabeláč 31

Martina Roesselová 37

Vladimír Sychrovský 34

Filip Ryjáček 29

Bohdan Schneider 46

kapacita: všichni 70%

Zahraníční hosté (celkový úvazek 0.9)

Teresa Král (3 měsíce, úvazek 100%)

Chris Switzer (3 měsíce, úvazek 100%)

Pedro Salvador (1 měsíc, úvazek 100%)

Marius Lewerenz (1 týden, úvazek 100%)

Otto Dopfer (1 týden, úvazek 100%)

Camille Sandorfy (1 týden, úvazek 100%)

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

---

Burkhard Schmidt (1 týden, úvazek 100%)  
Wiktor Zierkiewicz (2 týdny, úvazek 100%)

Studenti PhD (celkem 19)

Milan Šindelka 26  
Markéta Davidová 26  
Petr Slavíček 26  
Jana Chocholoušová 25  
David Řeha 26  
Petr Jurečka 26  
Michal Hanus 27  
Alexandr Prokop 27  
Jan Kučera 25  
Martin Šilhan 24  
Jiří Černý 23  
Jaroslav Rejnek 23  
Shai Ronen 31  
Martin Mucha 22  
Martin Beneš 25  
Miloš Kalhous 26  
Jan Sýkora 25  
Aleš Benda 22  
Jana Humpolíčková 22

Studenti Mgr (celkem 6)

Eva Mrázková 22  
Tomáš Kubař 23  
Jaroslav Pekárek 22  
Jan Řezáč 21  
Jindřich Fanfrlík 21  
Jan Honzíček 21

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 33,6.

Průměrný věk kmenových pracovníků, PhD. studentů a diplomantů je 27,9.

Složení vědeckých pracovníků Centra se v roce 2002 podstatně nezměnilo. Dana Nachtigallová skončila mateřskou dovolenou a nastoupila do Centra. V Centru na pracovišti nositele pracovalo v roce 2002 15 vědeckých pracovníků (celkový úvazek 10.5), 8 zahraničních pracovníků (celkový úvazek 0.9), 15 PhD studentů a 5 studentů.

**Spolunositel 1:**

Prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc 59 let  
Prof. Ing. Stanislav Labík, CSc. 51 let  
RNDr. Jiří Kolafa, CSc., 44 let (od listopadu 2001)

Studenti PhD (celkem 6)

Ing. Jan Bumba 26 let  
Mgr. Alexandr Malijevský 25 let

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

---

Ing. Iva Odvářková 27 let  
Ing. Jan Veverka 24 let (externí studium)  
Ing. Tomáš Hujo 24 let  
Pavel Morávek, 23 let

Studenti Mgr (celkem 2)  
Hana Gabrielová 22 let  
Magdalena Francová 21 let

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je letos 33,7 (loni byl 37,1). Průměrný věk kmenových pracovníků, PhD. studentů a magisterských studentů (tj. celkový věkový průměr pracoviště spoluřešitele I.) je 31,4. Celkem tedy tým spoluřešitele tvoří 3 mezinárodně zkušení odborníci (celkový úvazek 2.1), 6 studentů doktorských studijních programů (celkový úvazek 1.6) a 2 studenti magisterských studijních programů.

**Spolunositel 2:**

Počet kmenových prac.: 4  
Petr Kužel 35  
Filip Kadlec 31  
Santhi Surendran 38  
Christelle Kadlec 31

PhD studenti: 2  
Hynek Němec 23  
Alexei Pashkin 26

Diplomant: 1  
Jaroslav Hlinka 22

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 30,7.  
Celkový úvazek kmenových pracovníků: 2,5  
Celkový úvazek PhD studentů: 0,7

**Spolunositel 3:**

Počet kmenových prac. 4  
Zdeněk Havlas 51 let  
Mojmír Kývala 34  
Lubomír Rulíšek 30 (v červnu odešel na dlouhodobou stáž do Švedska)  
Daniel Svozil 31 (nastoupil na místo Rulíška)  
Jiří Vondrášek 39

PhD. studenti: 3



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

---

Martin Švec 28  
Martin Lepšík 26  
Vojtěch Klusák 23

Diplomanti:2  
Jakub Chalupský 22  
Lada Bendová 21

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 33.0.  
Průměrný věk kmenových pracovníků, PhD. studentů a diplomantů je 30.4.  
Všichni kmenoví prac. 70% (Celkový úvazek 2.8)  
PhD. studenti 100% (Celkový úvazek 3.0).

### **3. Přístrojové vybavení a technické zabezpečení Centra**

V letošním roce nebyly Centru přiděleny žádné investiční prostředky, a proto nedošlo k zásadní změně v přístrojovém vybavení. Z režijních prostředků došlo k modernizaci hardware i software. Provedli jsme upgrade počítačového klastru zakoupením 6 duálních počítačů s nejrychlejšími procesory Athlon. Dále jsme zvýšili počet koncových stanic (osobních počítačů) o šest a nově vybavili počítači výpočetní laboratoř. V současné době tedy máme k dispozici 4-procesorový server Compaq Alpha ES-40 s 8 Gb paměti a 220 Gb diskového pole, 3x duální SGI Itanium s 18 Gb paměti a 120 Gb diskového pole a 100procesorový moderní linuxový klastr. Spoluřešitelé 1. a 3. disponují klastrem 10 počítačů PC Pentium 3.

Co se týče experimentální části Centra, je u spoluřešitele 2. instalován zesílený laditelný femtosekundový systém Quantronix, který napájí v laboratoři postavený terahertzový spektrometr. U nositele 2 hlavní fluorescenční spektrometry: a) fluorescenční korelační mikroskop, pro výzkum jednotlivých DNA a lipidových molekul; b) časově rozlišený fluorescenční spektrometr pro charakterizaci ps procesů.

### **4. Spolupráce Centra**

Centrum funguje v rámci ČR jako konzultační středisko v oboru teoretické a výpočetní chemie. Konkrétně se jedná o konzultace v oboru molekulových interakcí, molekulové dynamiky, anharmonických vibračních výpočtů, teoretického modelování heterogenní katalýzy, simulace nanostruktur, struktury a dynamiky DNA. Našich služeb využívají zejména tato tuzemská pracoviště: Univerzita Palackého, Olomouc; Anorganický ústav AV ČR; Biofyzikální ústav AV ČR; Univerzita Pardubice a Masarykova Univerzita, Brno.

V rámci Centra se dále prohlubuje integrace jednotlivých pracovišť. Společně jsou řešena především tato témata: studium nepravé vodíkové vazby (nositel a spoluřešitel 3), struktura a dynamika plynné a kondenzované fáze těžších vzácných plynů (nositel a spoluřešitel 1) a teoretické a experimentální studium ultrarychlé solvatace (nositel a

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

---

spoluřešitel 2). Novým rysem spolupráce v letošním roce je společný projekt s Biomolekulárním Centrem v Brně.

Úspěšně naplňovanou ambicí centra je postupné začleňování do mezinárodních výzkumných struktur. V rámci této činnosti jsme podnikli následující kroky. Centrum se aktivně zapojilo do 6. rámcového programu EU podáním "Expression of Interest". Naše Centrum zde figuruje jako koordinátor "Network of Excellence – NABIOM", sdružující 27 pracovišť z 8 zemí EU a asociovaných zemí. Navíc dvě významné zahraniční univerzity - University of Pittsburgh a Goethe University Frankfurt, projevíly zájem o realizaci společného doktorského programu. Příslušná smlouva s University of Pittsburgh je již v závěrečné fázi schvalování, s Goethe University Frankfurt probíhají jednání.

### **5. Podpora a výchova mladých výzkumných pracovníků (aktuální stav)**

Od vzniku Centra se počet studentů plynule zvyšuje. 10 vědeckých pracovníků Centra zabezpečuje doktorské studijní programy 30 postgraduálních a 11 pregraduálních studentů z UK, VŠCHT, ČVUT a Univerzity Pardubice. Na základě dosažených vědeckých a studijních výsledků jsou postgraduální studenti i diplomanti pravidelně finančně odměňováni z prostředků Centra. Celkově tato podpora dosahuje 1.2 mil. Kč ročně. Školící pracovníci věnují studentům nejméně polovinu své pracovní kapacity. Podíl studentů na práci Centra je zcela zásadní a v Příloze I je podrobně dokumentován publikačním výstupem a prezentacemi na mezinárodních konferencích. Stejně tak je v Příloze 1 podrobně zachycen přínos mladých výzkumných pracovníků do 35 let. Tito pracovníci, kteří svou celou pracovní kapacitou (70%) významně přispívají k výsledkům Centra, dostávají plnou podporu od starších pracovníků, kteří konzultují, jakož i přímo se podílejí na práci mladších kolegů.

### **6. Podpora mladých výzkumných pracovníků (konkrétní příklady)**

V Centru pracuje 9 mladých vědeckých pracovníků do 35 let. Z nich je jeden na pozici „postdoka“, 7 na pozicích samostatných vědeckých pracovníků a jeden je ve vedoucí funkci (spoluřešitel 2). Je samozřejmé, že tito pracovníci si zaslouží plnou podporu Centra, neboť přinášejí nová vědecká témata: terahertzová femtosekundová spektroskopie (P. Kužel), simulace nanostruktur (J. Vacek), výpočty NMR charakteristik (V. Sychrovský), aj. Základním způsobem podpory těchto pracovníků je jejich významně zvýšené finanční ohodnocení z prostředků Centra. Dále je jim a jejich studentům plně hrazena účast na konferencích a studijních stážích a veškeré další náklady na jejich práci.

### **7. Způsoby zpřístupnění výsledků a výstupů Centra veřejnosti**

V roce 2002 jsme podnikli řadu významných kroků k širšímu zpřístupnění výsledků Centra. Především jde o nově koncipovanou internetovou stránku Centra [www.molecular.cz](http://www.molecular.cz). V kapitolách „People“, „Research“, „Publications“, „Archive“ a „Events“ referujeme o

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

vědeckých programech a doktorských tématech, personálním složení, publikacích (včetně abstraktů) a aktualitách v Centru. Pro ilustraci uvádíme domácí stránku Centra:

Center for Complex Molecular Systems and Biomolecules  
 Supported by the Ministry of Education, Czech Republic

People | Research | Publications | Archive | Events | Contact

### What do we do

The Center focuses on the theoretical, computational, and experimental study of molecular clusters, DNA, molecular sieves, and aminoacids. The Center also provides PhD. and Ms. training as well as basic and advanced courses in molecular sciences.  
[more...](#)

### About us

The funding of the Centre has been provided by the Ministry of Education of Czech Republic (grant No. LN00A032) for the period of 2000–2004 with a possible extension. The researchers are based in the following institutes:

[J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry](#)  
[Prague Institute of Chemical Technology](#)  
[Institute of Organic Chemistry and Biochemistry](#)  
[Institute of Physics](#)

[more...](#)

### Seminars

- 02. December 2002 at Jaroslav Heyrovsky Institute  
 M. C. Holthausen (University of Marburg) – Quantum chemical insights into the hydroxylation activity of biomimetic models for dinuclear copper proteins
- 28. November 2002 at IOCB  
 D. Svozil (IOCB AS CR) – The DNA Computing.

[more...](#)

### News

- 18. November 2002  
 IBM researchers have built and operated the world's smallest working computer circuits using a new approach in which individual molecules move across an atomic surface like toppling dominoes.
- 13. November 2002  
[Internet Archive Wayback Machine](#) is a collection of archived Web pages, allowing users to revisit older copies of sites.

[more...](#)

Dále jsme realizovali následující popularizační aktivity. P. Hobza vystoupil jako hlavní host v televizním pořadu “Třetí k čaji“ (ČT 2, 1. 11. 21:30-22:00) . Simulace nanostruktur J. Vacka byla prezentována v televizním pořadu “Vědník 9/02“. P. Jungwirth vystoupil v televizním diskusním pořadu o perspektivách české vědy. V Lidových novinách jsme publikovali článek o Centrech a financování vědy v ČR. Ve Vesmíru vyšla diskuse o hodnocení vědců a vědecké práce a populárně vědecký článek o výsledcích Centra. Podíleli

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

---

jsme se také na Dnech otevřených dveří AV ČR, které jsou zaměřeny zejména na středoškolskou mládež.

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

---

**Podrobná specifikace a zdůvodnění jednotlivých položek finančních prostředků projektu čerpaných v roce 2002<sup>2</sup>**

**Nositel:**

1. Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)

investiční: 0

mzdové: 2 700

režijní: 5 460

Režijní prostředky:

Příspěvek na režii pracoviště (overhead)	936
Pojištění	945
Příspěvek ke stipendiím	870
Cestovné a konference	860
Software	250
Provoz a údržba počítačů a sítí	220
Chemikálie	170
Upgrade počítačů	550
Drobný majetek	250
Provozní náklady	409

Režijní i mzdové prostředky byly použity podle plánu.

**Spolunositel 1:**

**Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)**

investiční: 0

neinvestiční: 1 728

z toho mzdové: 768

neinvestiční prostředky:

režije pracoviště (overhead, 20%): 138

sociální a zdravotní pojištění (35% mzdových prostředků): 269

drobný majetek a spotřební materiál: 463

Vědecké pobyty a konference: 90

Mzdy a odměny: 768

Prostředky byly čerpány v souladu s návrhem pro rok 2002.

---

<sup>2</sup> 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

---

### **Spolunositel 2:**

#### **Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)**

investiční: 0  
neinvestiční: 1548  
z toho mzdové: 570

neinvestiční prostředky:  
pojištění + FKSP: 211  
příspěvek na režii FZÚ (overhead): 154  
drobný majetek (optický a mechanický hardware) a spotřební materiál: 368  
Vědecké pobyty a konference: 245  
Mzdy a odměny: 570

Prostředky byly čerpány v souladu s návrhem pro rok 2002.

### **Spolunositel 3:**

#### **Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)**

investiční: 0  
neinvestiční: 1344  
z toho mzdové: 936

#### **Specifikace a zdůvodnění výdajových položek (v tisících Kč)**

neinvestiční prostředky:  
pojištění + FKSP: 307  
příspěvek na režii ÚOCHB (overhead): 166  
literatura, drobný majetek a spotřební materiál, technické zhodnocení: 785  
Vědecké pobyty a konference: 86  
Mzdy a odměny: 936

Prostředky byly čerpány v souladu s návrhem pro rok 2002.

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

---

### **Přehled a upřesnění dílčích cílů projektu a postupu při jejich naplňování pro následující období, tj. pro r. 2003<sup>3</sup>**

#### **Nositel:**

Bude studována elektronická podstata pravé a nepravé vodíkové vazby se snahou vypracovat společný model pro všechny typy vazeb charakteristické sdílením vodíku.

Budou studovány tautomerní rovnováhy basí nukleových kyselin v plynné i vodné fázi.

Budou pokračovat přesné výpočty interakčních energií planárních a patrových komplexů basí nukleových kyselin, kde celková interakční energie je konstruována jako součet „complete basis set limit“ MP2 interakční energie a rozdílu interakčních energií určených na MP2 a CCSD(T).

Bude studována struktura a koordinace iontů alkalických kovů ve vysokosilikátových maticích. Dále bude studována interakce molekulových prób (pyrrol) s bazickými centry ve vysokosilikátových maticích obsahujících alkalické kovy a na základě provedené teoretické studie bude navržena interpretace experimentálních spektroskopických dat. Bude pokračovat studium interakce oxidů dusíku z kationty tranzitních kovů ve vysokosilikátových maticích.

Bude studován vliv matic inertních plynů na vibrační dynamiku solvatovaných iontů a polárních molekul.

Bude modelována změna povrchové struktury vodných aerosolů přítomností rozpuštěných molekulových iontů.

Bude vytvořen model okamžitých normálních módů k popisu relaxace solventu po fotoexcitaci chromoforu.

Bude modelován "pick-up" malých chromoforů kryogenními klastry inertních plynů.

Bude studován vliv prostředí a silového pole (vibrací) na NMR spektroskopické parametry.

Bude studována vibrační anharmonicitu vybraných módů bazí DNA.

Bude budována aproximativní teorie radiativní asociace polyatomových molekul.

#### **Spolunositel 1:**

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

Bude navržena nová stavová rovnice kompatibilní s přesnými simulovanými daty pro systém tuhých koulí

---

<sup>3</sup> 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

---

Budeme se dále zabývat výpočtem termodynamických vlastností a vnitřní struktury směsí tzv. molekulárních tekutin

Pomocí počítačových simulací budou studovány systémy s indukovanými dipóly

Ve spolupráci s řešitelem a s "Ostravskou skupinou" budou simulovány a porovnány s experimentem makroskopické veličiny těžších vzácných plynů

Budou studovány globální fázové diagramy směsí z teoreticky podložených stavových rovnic navržených na našem pracovišti.

Budou rozvíjeny postupy v rámci "Density functional theory" a "Fundamental measure theory"

Budeme dále rozvíjet metody výpočtu chemických potenciálů kondenzovaných systémů pomocí počítačových simulací

### **Spolunositel 2:**

Bude proměřena sub-pikosekundová a pikosekundová dynamika relaxace solvatační vrstvy polárních molekul chloroformu po fotoexcitaci kumarinu153; interpretace měření bude provedena v součinnosti se skupinou P. Jungwirtha pomocí simulací molekulární dynamiky. Budeme se zároveň soustředit na výběr biologicky významných systémů vhodných ke studiu pomocí naší experimentální metody.

V případě nedostatečně přesných experimentálních výsledků (nízký poměr signál/šum) připadají v úvahu dvě možné úpravy měřicího uspořádání:

- zavést rychlé časové skenování THz signálu s akumulací dat (přeprogramování zpoždovacích drah, synchronizace s detekcí) za účelem zkrácení neúčinných časových prodlev a možnosti justování THz optiky v reálném čase
- přejít k (dosud nepoužitému a nepublikovanému) uspořádání, kdy každý laserový puls je rozštěpen na dva, z nichž jeden slouží k měření v rovnováze a druhý k měření s fotoexcitací. Dle našich odhadů je tímto způsobem možné výrazně snížit vliv "shot-to-shot" šumu laserového systému.

### **Spolunositel 3:**

Ve spolupráci s Oddělením biochemie budou testovány teoreticky navržené peptidové sekvence pro selektivní interakce polutantních kovových iontů.

Programy pro výpočet relativistických efektů v organických biradikálech aplikovány na výpočty spin-orbitálních vazeb a spin-spinových interakcí ve vybraných systémech s fotochemickým významem. Programový balík bude dále rozšířen o nové funkce (analýza příspěvků, zahrnutí symetrie).

Budou rozšířeny studie UV spekter a fotoreaktivity u modelů paralelních benzenů.

Budou studovány interakce nepolárních ligandů s proteiny a navržené modifikace ligandů budou studovány experimentálně ve spolupráci s pracovišti ÚOCHB. Bude učiněn pokus o vylepšení metod založených na silovém poli o odpovídající popis interakcí s nepolárními látkami.



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

---

Bude pokračovat studium problému 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

---

**Kalkulace předpokládaných celkových finančních výdajů projektu v r. 2003, vč. podrobné specifikace, jejich členění a zdůvodnění jednotlivých položek<sup>4</sup>**

**Nositel:**

Investice: 6 000  
Režie: 5 460  
Mzdy: 2 700  
Celkem: 14 220

Plánované investiční prostředky budou použity k nákupu multiprocessorové pracovní stanice vybavené 64bitovými procesory Intel a klastru 32bitových Linuxových počítačů.

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).

**Spolunositel 1:**

Investice: 0  
Neinvestice: 1728  
Z toho mzdy: 768  
Z toho režie: 960  
Celkem: 1728

Neinvestiční prostředky použijeme na pokrytí nákladů na pracovní cesty a mezinárodní vědecká setkání, nákup literatury, upgrade výpočetní techniky, běžný provoz, sociální a zdravotní zabezpečení (269) a režii pracoviště (138). Mzdové prostředky použijeme na mzdy a odměny kmenovým pracovníkům a studentům doktorských a magisterských programů. Investiční prostředky na rok 2003 nejsou plánovány.

**Spolunositel 2:**

**Rozpis celkových výdajů (v tisících Kč)**

investiční: 0  
neinvestiční: 1548  
z toho mzdové: 570

investiční prostředky:  
v roce 2003 nejsou naplánovány

neinvestiční prostředky:  
pojištění + FKSP: 210  
příspěvek na režii FZÚ (overhead): 154

---

<sup>4</sup> 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

Neinvestiční prostředky použijeme na pokrytí nákladů na pracovní cesty a mezinárodní vědecká setkání, na běžný provoz laboratoře (spotřební materiál, chemikálie) a na nákup drobných optických a mechanických prvků; dále pak na sociální a zdravotní zabezpečení a režii pracoviště (overhead). Mzdové prostředky použijeme na mzdy a odměny kmenovým pracovníkům a studentům doktorských a magisterských programů. Investiční prostředky na rok 2003 nejsou plánovány.

**Spolunositel 3:**

investiční: 0

neinvestiční: 1344

z toho mzdové: 936

neinvestiční prostředky:

pojištění + FKSP: 307

příspěvek na režii ÚOCHB (overhead): 166

literatura, drobný majetek a spotřební materiál, technické zhodnocení, cestovné a konference, software, chemikálie: 871

Mzdy a odměny: 936

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

---

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

(max. rozsah 254 znaků)

V Praze

dne:20. listopadu 2002

---

řešitel projektu  
(podpis)

---

příjemce  
(razítko a podpis statut .zást. příjemce)

---

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

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

---

### **Príloha I (Kompletní seznam publikací a příspěvků na konferencích)**

#### **Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2002**

##### **Vyšlé publikace v časopisech:**

1. Bouř P., Sychrovský V., Maloň P., Hanzlíková J., Baumruk V., Pospíšek , Buděšínský M.: Conformation of the Dipeptide Cyclo(L-Pro-L-Pro) Monitored by the Nuclear Magnetic Resonance and the Raman Optical Activity Spectra. Experimental and ab initio Computational Study. *J. Phys. Chem. A* **106**, 7321-7327 (2002).
2. Sychrovský V., Vacek J., Hobza P., Žídek L., Sklenář V., Cremer D.: Exploring the Structure of a DNA Hairpin with the Help of NMR Spin-Spin Coupling Constants: An Experimental and Quantum Chemical Investigation. *J. Phys. Chem. B* **106**, 10242-10250 (2002).
3. Řeha D., Kabeláč M., Ryjáček F., Šponer J., Šponer J.E., Elstner M., Suhai S., Hobza P.: Intercalators. 1. Nature of Stacking Interactions between Intercalators (Ethidium, Daunomycin, Ellipticine and 4",6-Diaminide-2-phenylindole) and DNA Base Pairs. Ab initio Quantum Chemical, Density Functional Theory and Empirical Potential Study. *J. Am. Chem. Soc.* **124**(13), 3366-3376 (2002).
4. Jurečka P., Hobza P.: On the Convergence of the ( $\Delta$ ECCSD(T)- $\Delta$ EMP2) Term for Complexes with Multiple H-bonds. *Chem. Phys. Lett.* **365**, 89-94 (2002).
5. Šponer J., Leszczynski J., Hobza P.: Electronic Properties, Hydrogen Bonding, Stacking, and Cation Binding of DNA and RNA Bases. *Biopolymers* **61**(1), 3-31 (2002).
6. Lankaš F., Cheatham III T. E., Špačková N. Hobza P., Langowski I., Šponer J.: Critical Effect of the N2 Amino Group on Structure, Dynamics, and Elasticity of DNA Polypurine Tracts. *Biophys. J.* **82**(5), 2592-2609 (2002).
7. Trygubenko S. A., Bogdan T. V., Rueda M., Orozco M., Lague F. J., Šponer J., Slavíček P., Hobza P.: Correlated ab initio Study of Nucleic Acid Bases and Their Tautomers in the Gas Phase, Microhydrated Environment, and in Aqueous Solution. Part 1. Cytosine. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **4**, 4192-4203 (2002).
8. Hobza P., Šponer J.: Towards True DNA Base Stacking Energies: MP2, CCSD(T) and Complete Basis Set Calculations. *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 11802-11808 (2002).
9. Schmidt K. S., Reedijk J., Weisz K., Janke E. M. B., Šponer J.E., Šponer J., Lippert B.: Loss of Hoogsteen Pairing Ability upon N1 Adenine Platinum Binding. *Inorg. Chem.* **41**(11), 2855-2863 (2002).
10. Kraemer W. P., Špirko V., Bludský O.: Bound and Low-Lying Quasi-Bound Rotation-Vibration Energy Levels of the Ground and First Excited Electronic States of HeH<sub>2</sub><sup>+</sup>. *Chem. Phys.* **276**,

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

---

225-242 (2002).

11. Zierkiewicz W., Michalska D., Havlas Z., Hobza P.: Study of the Nature of Improper Blue-Shifting Hydrogen Bonding and Standard Hydrogen Bonding in the X3CH...OH2 and XH...OH2 Complexes (XF, Cl, Br, I): Correlated ab initio Study. *Chem.Phys.Chem* **3**(6), 511-518 (2002).
12. Chocholoušová J., Vacek J., Hobza P.: Potential Energy and Free Energy Surfaces of the Formic Acid Dimer: Correlated ab initio Calculations and Molecular Dynamics Simulations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **4**, 2119-2122 (2002).
13. Spuhler P., Holthausen M. C., Nachtigallová D., Nachtigall P., Sauer J.: On the Existence of Cu(I) Dimers in ZSM-5 - A Computational Study. *Chem. Eur. J.* **8**(9), 2099-2115 (2002).
14. Bludský O., Šilhan M., Nachtigall P.: Theoretical Investigation of the Effect of the Rare Gas Matrices on the Vibrational Spectra of Solvated Molecular Ions: Cu+CO. *J. Chem. Phys.*, **117**, 9298-9304 (2002).
15. P. Nachtigall, M. Davidová, M. Šilhan, D. Nachtigallová: Interaction of Small Molecules with Transition Metal Ions in Zeolites: The Effect of the Local Environment, In: Impact of zeolites and other porous materials on the new technologies at the beginning of the new millennium. R. Aiello, G. Giordano, and F. Testa, Editors, Elsevier, Amsterdam, 2002, pages 101-108, *Studies in Surface Science and Catalysis* **142**.
16. Šindelka M., Špirko V., Jungwirth P.: Electrons Weakly Bound to Hydrogen Bonded Clusters: A Pseudopotential Model Including Dispersion Interactions. *J. Chem. Phys.* **117**, 5113-5123 (2002).
17. Jungwirth P., Tobias D. J.: Ions at the Air Water Interface. *J. Phys. Chem. B* **106**, 6361-6373 (2002).
18. Bradforth S. E., Jungwirth P.: Excited States of Iodide Anions in Water: A Comparison of the Electronic Structure in Clusters and in Bulk Solution. *J. Phys. Chem. A* **106**(6), 1286-1298 (2002).
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. A* **106**(2), 379-383 (2002).
20. Šindelka M., Špirko V., Urban J., Mach P., Leszczynski J.: Potential Energy Surface and Rotational Energies of Ne3+ in the Ground Electronic State. *Int. J. Quantum Chem.* **90**, 1232-1239 (2002)
21. Sýkora J., Mudogo V., Hutterer R., Nepraš M., Vaněrka J., Kapusta P., Fidler V., Hof M.: ABA-C15: A New Dye for Probing Solvent Relaxation in Phospholipid Bilayers. *Langmuir* **18**(24), 9276-9282 (2002)

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

---

22. Sýkora Jan, Kapusta P., Fidler V., Hof Martin: On What Time Scale Does Solvent Relaxation in Phospholipid Bilayers Happen?. *Langmuir* **18**(3), 571-574 (2002).
23. Sýkora Jan, Hof Martin: Solvent Relaxation in Phospholipid Bilayers: Physical Understanding and Biophysical Applications. *Cell. Mol. Biol. Lett.* **7**(2), 259-261 (2002)
24. Kral T., Hof Martin, Jurkiewicz P., Langner M.: Fluorescence Correlation Spectroscopy (FCS) as a Tool to Study DNA Condensation with Hexadecyltrimethylammonium Bromide (HTAB). *Cell. Mol. Biol. Lett.* **7**(2), 203-211 (2002)
25. Kral T., Langner M., Beneš Martin, Baczynska B., Ugorski M., Hof Martin: The Application of Fluorescence Correlation Spectroscopy in Detecting DNA Condensation. *Biophys. Chem.* **95**(1), 135-144 (2002)
26. Kral T., Hof Martin, Langner M.: The Effect of Spermine on Plasmid Condensation and Dye Release Observed by Fluorescence Correlation Spectroscopy. *Biol. Chem.* **383**, 331-335 (2002).
27. Hutterer R., Hof Martin: Probing Ethanol-Induced Phospholipid Phase Transitions by the Polarity Sensitive Fluorescence Probes Prodan and Patman. *Z. Phys. Chem.* **216**, 333-346 (2002)
28. Beneš Martin, Billy D., Hermens W. T., Hof Martin: Muscovite(Mica) Allows the Characterisation of Supported Bilayers by Ellipsometry and Confocal Fluorescence Correlation Spectroscopy. *Biol. Chem.* **383**(2), 337-341 (2002)
29. Jiří Kolafa, Stanislav Labík, Anatol Malijejský: The bridge function of hard spheres by direct inversion of computer simulation data. *Mol. Phys.* , **100**, 2629 - 2640 (2002).
30. Němec H., Kadlec F., Kužel P.: Methodology of optical pump-terahertz probe experiment: an analytical frequency-domain approach, *J. Chem. Phys.* **117**, 8454-8466 (2002).
31. Nather C; Jess I; Havlas Z; Bolte M; Nagel N; Nick S.: Trimorphism of 4,4 '-Di(tert.-butyl)-biphenyl structural, thermodynamic and kinetic aspects. *Solid State Sci.* **4**, 859-871 (2002).
32. Havlas Z., Michl J.: Prediction of an inverse heavy-atom effect in H-C-CH<sub>2</sub>Br: Bromine substituent as a pi acceptor. *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 5606-5607 (2002).
33. Rulišek L., Havlas Z.: Theoretical studies of metal ion selectivity. 2. DFT calculations of complexation energies of selected transition metal ions (Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, and Hg<sup>2+</sup>) in metal-binding sites of metalloproteins. *J. Phys. Chem. A* **106**, 3855-3866 (2002).
34. Horn M., Baudys M., Voburka Z., Kluch I., Vondrášek J., Mares M.: Free-thiol Cys331 exposed during activation process is critical for native tetramer structure of cathepsin C (dipeptidyl peptidase I). *Protein Sci.* **11**, 933-43 (2002).
35. Lepšík M., Vondrášek J.: Application of MM-PBSA functionality in AMBER to the binding of inhibitors to HIV protease. *Materials Struct.* **19**, 43-4, (2002).

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

---

36. Vondrášek J., Wlodawer A.: HIVdb: A Database of the Structures of Human Immunodeficiency Virus Protease. *Proteins* **49**, 429-431 (2002).

#### **Vyšlé knižní publikace:**

1. Hobza P.: Improper, Blue-Shifting Hydrogen Bond: Theory and Experiment. In: *Strength from Weakness: Structural Consequences of Weak Interactions in Molecules, Supermolecules, and Crystals.* (Domenicano, A. - Hargittai, I., Ed.), pp. 281-291, Kluwer Academic, Dordrecht 2002.
2. Hutterer R., Hof M.: Fluorescence Approaches for the Characterisation of the Peripheral Membrane Binding of Proteins Applied for the Blood Coagulation Protein Prothrombin. In: *Fluorescence Spectroscopy, Imaging and Probes.* (Kraayenhof, R. - Visser, A. J. W. G. - Gerritsen, H. C., Ed.), pp. 225-239, Springer, Weinheim 2002.

#### **Publikace v tisku a zaslané:**

##### **Práce v časopisech:**

1. Hof M.: Solvent Relaxation as a Tool for Probing Micro-Polarity and -Fluidity. *Prog. Reac. Kinet. Mech.*
2. Jurkiewicz P., Okruszek A., Hof M., Langner M.: Associating Oligonucleotides with Positively Charged Liposomes. *Cell. Mol. Biol. Lett.*
3. Häfner A., Beneš M., Mérola F., Duportail G., Schneider F. W., Hof M.: Time-resolved Tryptophan Fluorescence of Factor X Fragment 1-86 and the Influence of Membrane Binding. *Collect. Czech. Chem. Commun.*
4. Jungwirth P., Gerber R. B., Ratner M. A.: Quantum Simulations of Vibrational Dephasing of Molecules in a Cryogenic Environment: HARF in an Argon Cluster. *Isr. J. Chem.*
5. Roeselová M., Mucha M., Schmidt B., Jungwirth P.: Quantum Dynamics and Spectroscopy of Electron Photodetachment in Cl-...H<sub>2</sub>O and Cl-...D<sub>2</sub>O Complexes. *J. Phys. Chem. A.*
6. Jungwirth P., Curtis J. E., Tobias D. J.: Polarizability and Aqueous Solvation of Sulfate Dianion. *Chem. Phys. Lett.*
7. Davidová M., Nachtigall P.: Možnosti moderní výpočetní chemie pro popis vlastností přechodných kovů v zeolitech. *Chem. Listy.*
8. Davidová M., Nachtigallová D., Bulánek R., Nachtigall P.: Characterization of the Cu<sup>+</sup> Sites in High-silica Zeolites Interacting with CO Molecule: Combined Computational and Experimental Study. *J. Phys. Chem. B.*
9. Šilhan M., Nachtigall P., Bludský O.: Theoretical Investigation of the Effect of the Rare Gas Matrices on the Vibrational Spectra of Solvated Molecular Ions: Ag<sup>+</sup>CO. *Chem. Phys. Letters.*



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

---

10. J. Kučera, P. Nachtigall: Coordination of Alkali Metal Ions in ZSM-5: A Combined Quantum Mechanics/Interatomic Potential Function Study, *Phys. Chem. Chem. Phys.*
11. Čejchan A., Špirko V.: Transforming from Internal Coordinates to Cartesian Displacements in the Eckart Frame. A Taylor Series Expansion Approach. *J. Mol. Spectrosc.*
12. Mrázková E., Hobza P.: Hydration of Sulpho and Methyl Groups in Dimethyl Sulfoxide is Accompanied by Formation of Red-shifted Hydrogen Bonds and Improper Blue-shifted Hydrogen Bonds: An ab initio Quantum Chemical Study. *J. Phys. Chem. A.*
13. Engkvist O., Brdarski S., Šponer J., Hobza P.: Polarizable Intermolecular Potentials for the DNA and RNA Bases. *J. Comput. Chem.*
14. Hobza P., Havlas Z.: Improper, Blue-Shifting Hydrogen Bond. *Theor. Chem. Acc.*
15. Chocholoušová J., Vacek J., Huisken F., Werhahn O., Hobza P.: Stacked Structure of the Glycine Dimer is More Stable than the Cyclic Planar Geometry with Two O-H...O Hydrogen Bonds: Concerted Action of Empirical, High-level Non-empirical ab initio, and Experimental Studies. *J. Phys. Chem. A.*
16. Hobza P., Riehn CH., Weichert A., Brutschy B.: Structure and Binding Energy of the Phenol Dimer: Correlated ab initio Calculations Compared with Results from Rotational Coherence Spectroscopy. *Chem. Phys.*
17. Braun J., Neusser H. J., Hobza P.: N-H... interactions in the indole...benzene-h<sub>6</sub>,d<sub>6</sub> and indole...benzene-h<sub>6</sub>,d<sub>6</sub> cation radical complexes. Mass Analyzed Threshold Ionization experiments and correlated ab initio quantum chemical calculations. *J. Phys. Chem. A.*
18. Hobza P., Špirko V.: Why is the N1-H stretch vibration frequency of guanine shifted upon dimerization to the red and the amino N-H stretch vibration frequency to the blue? *Phys. Chem. Chem. Phys.*
19. Sychrovský V., Schneider B., Hobza P., Žídek L., Sklenář V.: The Effect of Water Solvent on NMR Spin-Spin Couplings in DNA: Improvement of Calculated Values by Application of Two Solvent Models. *Phys. Chem. Chem. Phys.*
20. Šindelka M., Špirko V., Kraemer W.P.: Vibrational linestrength for the ground and first excited electronic states of HeH<sub>2</sub><sup>+</sup>
21. Al. Malijeviský, A. Malijeviský, A. Santos, S. B. Yuste, M. López De Haro: Structure of ternary additive hard-sphere mixtures. *Phys. Rev. E.* v tisku.
22. S. Labík, H. Gabrielová, J. Kolafa, A. Malijeviský: Calculation of elementary diagrams using a Metropolis-like method. *Mol. Phys.*, v tisku.

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

---

23. P. Slaviček , R. Kalus , P. Paška, I. Odvářková, P. Hobza, A. Malijevský: State-of-the-art Correlated ab initio Potential Energy Curves for Heavy Rare Gas Dimers: Ar<sub>2</sub>, Kr<sub>2</sub> and Xe<sub>2</sub>. *J. Chem. Phys* (v recenzním řízení).
24. J. Genzer, J. Kolafa: Molecules dynamics of potential models with polarizability: Comparison of methods. *J. Mol. Liquids*, předloženo.
25. Kužel P., Dugautier C., Moch P., Le M. F., Karkut M.: Phase transition in lead titanate thin films: a Brillouin study, *J. Phys.: Cond. Matter* **14**, No. 47 (2002).
26. Němec H., Kadlec F., Kužel P.: Evaluation of data from optical pump – terahertz probe experiments using Fourier transformations, *Proceedings of 26-th International meeting on Infrared and Millimeter Waves*, (2003)
27. Němec H., Kadlec F., Kužel P., Khazan M., Schnüll S., Wilke I.: Carrier dynamics in low-temperature grown GaAs studied by THz emission spectroscopy, *Proceedings of 26-th International meeting on Infrared and Millimeter Waves*, (2003)
28. Němec H., Kadlec F., Kužel P.: Propagation of THz pulses in photoexcited media *J. Biol. Phys.*, zasláno.
29. Rulišek L., Havlas Z.: Theoretical Studies of Metal Ion Selectivity. 3. A Theoretical Design of the Most Specific Metal-Binding Sites of Metalloproteins for Selected Transition Metal Ions (Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, and Hg<sup>2+</sup>). *J. Phys. Chem. A* 2002.
30. Weber J., Mesters J. R., Lepšík M., Prejdová J., Švec M., Šponarová J., Mlčochová P., Stříšovský K., Uhlíková T., Souček M., Machala L., Staňková M., Vondrášek J., Klimkait T., Kraeusslich H-G., Hilgenfeld R., Konvalinka J.: Unusual binding mode of an HIV-1 protease inhibitor explains its potency against multi-drug-resistant virus strains. Accepted to *J. Mol. Biol.*, 2002.
31. Klusák V., Havlas Z., Rulišek L., Vondrášek J., Svatoš A.: Sexual Attraction in the silkworm moth: nature of binding of bombykol in Pheromone Binding Protein – an ab initio study. *Chem. Biol.*, 2002.

#### Knižní publikace:

1. Hutterer R., Hof M.: Membrane Binding of Peripheral Proteins and its Characterisation Applying Fluorescence Methods. In: Recent Research Developments in Proteins. Vol 1 (2002) (Pandalai, S. G., Ed.).
2. Hof M.: Luminescence. In: Handbook of Spectroscopy. Wiley-VCH
3. Jungwirth P. Physical Properties and Atmospheric Reactivity of Aqueous Sea Salt Micro-aerosols. In: Springer Verlag Cluster Series.

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 2002

1. Hobza P.: N-H...F Improper Blue-shifting H-Bond. *Int. J. Quantum Chem.* **90**, 1071-1074 (2002).
2. Burel R., Piecuch P., Špirko V., Bludský O.: Bound and quasi-bound states of the Li center dot center dot center dot FH van der Waals molecule: The effects of the potential energy surface and of the basis set superposition error. *J. Mol. Struct. Theochem* **591**, 151-174 (2002).
3. Špirko V., Čejchan A., Lutchny R., Leszczynski J.: Dimensionality of the Proton Transfer in the Intramolecular Hydrogen Bond of Formimidol. *Chem. Phys. Lett*, **355**, 319-326 (2002)
4. Cheng H., Chen Y., Liu H., Hwa L., Lin I., Kužel P., Petzelt J.: Terahertz and infrared spectroscopic study on dielectric properties of Bi(ZnNb)O for microwave application *Ferroelectrics* **272**, 255-260 (2002).
5. Pashkin A., Kužel P., Petzelt J., Gorshunov B., Dressel M.: Time-resolved and backward-wave oscillator submillimetre spectroscopy of some ferroelectric ceramics and thin films *Ferroelectrics* **272**, 219-224 (2002).
6. Kamba S., Porokhonskyy V., Pashkin A., Bovtun V., Petzelt J., Nino J. C., Trolier-McKinstry S., Lanagan M., Randall C.: Anomalous broad dielectric relaxation in Bi<sub>1.5</sub>ZnNb<sub>1.5</sub>O<sub>7</sub>, *Phys. Rev. B* **66**, 054106.1-8 (2002)

### Přednášky na konferencích a universitách

(Přednášky v rámci seminářů Centra nejsou uvedeny.)

### Vědečtí pracovníci

1. Structure and Dynamics of Nucleic Acid Base Pairs, P. Hobza, Chemistry towards Biology, Portorož, Slovinsko, 8. – 12.9.2002 (Invited plenary lecture).
2. Noncovalent Interactions with the Participation of Hydrogen, P. Hobza, 16th IUPAC Conference, San Diego, 3. – 10.8.2002 (Invited plenary lecture).
3. Noncovalent Interactions in DNA, University of California, P. Hobza, Riverside, USA, 15.8.2002
4. Structure and Dynamics of DNA Base Pairs, P. Hobza, Molecules of Biological Interest in the Gas Phase, Kreuth, SRN, 21.-26.7.2002 ((Invited plenary lecture).
5. Improper Blue-shifting H-bonding, P. Hobza, Université de Montréal, Montréal, Canada, 19.- 22.3.2002
6. Improper Blue-shifting H-bonding, P. Hobza, NRC Canada, Ottawa, 23.-27.3.2002
7. Molecular Tinkertoy Construction Kit: Computer Simulations of Molecular Propellers, Watoc, Lugano, Switzerland, 7.8. 2002
8. Molecular Tinkertoy Construction Kit: Computer Simulations of Molecular Propellers, *EURESCO konference " Supramolecular Chemistry: Molecular rods switches and Aires "*, San Feliu de Guixols, Spain, 14. 9. - 19. 9. 2002.
9. Molecular Tinkertoy Construction Kit: Computer Simulations of Molecular Propellers, *Konference NANO '02, Brno, 19. – 21. 11. 2002.*
10. Modeling Altitudinal Rotors, *DURINT Grant meeting, Boulder, CO, USA, 9. 5. 2002*

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

---

11. New view of the surface of salt solutions with implications for atmospheric chemistry, XIII Symposium on atomic and surface physics and related topics, Going, Austria, 17. - 23. 2. 2002, Pavel Jungwirth (invited lecture).
12. Molecules in rare gas clusters, Telluride symposium on doped rare gas clusters, Telluride, USA, 24. - 30. 6. 2002, Pavel Jungwirth (invited lecture).
13. Double tunneling in small polar cryogenic clusters binding an extra electron, 4th international conference on low temperature chemistry, Keuruu, Finland, 3. - 8. 8. 2002, Pavel Jungwirth (invited lecture).
14. Aqueous sea-salt aerosols: Molecular modeling with atmospheric implications, Molec XIV - European conference on dynamics of molecular collisions, Istanbul, Turkey, 1. - 6. 9. 2002, Pavel Jungwirth (invited lecture).
15. Solvent relaxation in phospholipid bilayers: W.Mejbaum-Katzenellenbogen's Molecular Biology Seminars: Liposomes. From Models to Applications in Wroclaw, Poland, 26-29.5.2002, Martin Hof (invited lecture)
16. Characterisation of SPB's by FCS: University Maastricht, CARIM, 11.4.2002, Martin Hof. Fluorescence Correlation Spectroscopy: Characterisation of Lateral Phospholipid Diffusion and Fluorescence Correlation Spectroscopy: Characterisation of DNA condensation:
17. University Strasbourg, Faculty of Pharmacy, 4.10.2002 and 8.10.2002 (both lectures by M. Hof)
18. Theoretical study of the effect of the local environment on the properties of active sites in Cu/zeolite systems, P. Nachtigall, Edinburgh, Skotsko (4.-9. 8. 2002)
19. Interaction of Small Molecules with Transition Metal Ions in Zeolites: The Effect of the Local Environment, P. Nachtigall, Taormina, Naxos, Italy (1. - 5. 9. 2002)
20. Theoretical investigation of spectroscopic properties of metal ion exchanged high-silica zeolites, P. Nachtigall, Wysowa Zdrój, Polsko, (22. - 26. 9. 2002)
21. Al. Malijevský, S. Labík, A. Malijevský: Chemical potentials of components using the SP-MC method, 6<sup>th</sup> Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Špindlerův Mlýn, 9. 6. - 14. 6. 2002
22. S. Labík, H. Gabrielová, J. Kolafa, A. Malijevský: Calculation of elementary diagrams using a Metropolis-like method, 6<sup>th</sup> Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Špindlerův Mlýn, 9. 6. - 14. 6. 2002.
23. P. Morávek, S. Labík: Calculation of Excess Volumes of Mixtures of Molecular Fluids Using the OZ Equation, 6<sup>th</sup> Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Špindlerův Mlýn, 9. 6. - 14. 6. 2002.
24. Al. Malijevský: Computer Simulations of Structure and Thermodynamics of Heavy Rare Gases Using Three Body Potentials, 6<sup>th</sup> Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Špindlerův Mlýn, 9. 6 - 14. 6. 2002.
25. Al. Malijevský, A. Malijevský, A. Santos, S. B. Yuste, M. López De Haro: Structure of ternary additive hard-sphere mixtures, 5<sup>th</sup> Liquid Matter Conference of the European Physical Society, 14. 9 - 18. 9. 2002.
26. J. Kolafa, S. Labík, A. Malijevský: The bridge function of hard spheres by direct inversion of computer simulation data, 6<sup>th</sup> Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Špindlerův Mlýn, 9. 6. - 14. 6. 2002.
27. J. Genzer, J. Kolafa: Molecules dynamics of potential models with polarizability: Comparison of methods, 6<sup>th</sup> Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Špindlerův Mlýn, 9. 6. - 14. 6. 2002.

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

---

28. J. Bumba, J. Kolafa, A. Malijecký: Global phase diagram using the BMCSL - Dieterici equation of state, 6<sup>th</sup> Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Špindlerův Mlýn, 9. 6. - 14. 6. 2002.
29. F. Kadlec: Frequency-domain approach to evaluation of data obtained in optical pump-terahertz probe experiments, 27-th conference on Infrared and millimeter waves, San Diego, USA, 22.9.-26.9 2002
30. F. Kadlec: Time-resolved Terahertz spectroscopy of condensed matter, XV Czech-Polish Seminar, Structural and Ferroelectric Phase Transitions, Nečtiny, 20.5.-24.5. 2002
31. V. Klusák, Z. Havlas: Interakce bombykolu s FBP. Mikrosymposium kvantové chemie, Nitra, duben 2002.
32. J.Vondrasek, Molekularni modelovani ve strukturalni biologii, Postgraduální kursy UMG.
33. J.Vondrasek, HIV structural database and its turnover, XIIth AIDS and related system meeting, Bethesda, June 2002, USA

### Studenti

1. Nature of Stacking Interaction between Intercalators and DNA Base Pairs, David Řeha, ICS-UNIDO, Trieste, Italy 11.7.2002
2. MD Simulations of Tinkertoys, Alexandr Prokop, ICS-UNIDO, Trieste, Italy 11.7.2002
3. Characterization of SPB's by ellipsometry, University Maastricht, CARIM, 11.4.2002, Martin Beneš
4. Characterization of alkali metal exchanged MFI zeolite: pyrrol as a probe molecule, Jan Kučera, Wysowa Zdrój, Polsko, (22. – 26. 9. 2002)
5. Theoretical investigation of the effect of the rare gas matrices on the vibrational spectra of solvated molecular ions:  $\text{Cu}^+\text{CO}$ , Martin Šilhan, Seminář studentů ÚFCH-JH AVČR Praha, ( 4. –5. 6. 2002)
6. Characterization of alkali-metal exchanged ZSM5: pyrrol as a probe molecule, Jan Kučera, Seminář studentů ÚFCH-JH AVČR Praha, ( 4. –5. 6. 2002)
7. Theoretical investigation of the coordination of alkali ions in MFI and an interaction with pyrrol as a probe molecule, Jan Kučera, XXXIV Symposium on catalysis, Praha, (4. –5. 2002)
8. Theoretical study of  $\text{Ag}^+$ /MFI and its interaction with NO and CO, Martin Šilhan, XXXIV Symposium on catalysis, Praha, (4. –5. 2002)
9. Ultrarychlá dynamika nositelů v LT GaAs: studium pomocí THz spektroskopie, 14. konference českých a slovenských fyziků, Plzeň, H. Němec , 9.9.-12.9. 2002.
10. Časově rozlišená THz spektroskopie kondenzovaných látek, 14. konference českých a slovenských fyziků, Plzeň, H. Němec , 9.9.-12.9. 2002

### Postery na konferencích

#### Vědeční pracovníci

1. DFT Calculation of NMR Spin – Spin Coupling Constants in Base Pairs of DNA Hairpin Molecule, EENC, Praha, 13.6. 2002, V. Sychrovský
2. Water Solvent Effect on DNA Hairpin <sup>1</sup>J and <sup>2</sup>J coupling Constants, Watoc, Lugano, Switzerland, 7.8. 2002, V. Sychrovský
3. Molecular Tinkertoy Construction Kit: Computer Simulations of Molecular Propellers, First International School and Conference on Nanoscale/Molecular Mechanics (N/M<sup>2</sup>-I). Maui, USA 12-17. 5., 2002, J. Vacek.

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

---

4. Interaction of oligonucleotides with positively charged liposomes using fluorescence techniques. W.Mejbaum-Katzenellenbogen's Molecular Biology Seminars: Liposomes. From Models to Applications in Wroclaw, Poland, 26-29.5.2002, Martin Hof, Teresa Kral
5. EURESCO konference "Molecules of Biological Interests" in the Gas Phase", Kreuth, SRN (21. – 26.7.2002) poster "Potential Energy Surfaces of Cytosine-Guanine Pair and Their Related Tautomers, Martin Kabeláč
6. P. Kužel: Propagation of THz pulses in photoexcited media: a new insight into time-resolved THz experiments. THz-Bridge Workshop, Capri, Itálie, 29.9.-2.10. 2002
7. S. Surendran: Characterization of femtosecond laser pulses using two-photon absorption, XV Czech-Polish Seminar, Structural and Ferroelectric Phase Transitions, Nečtiny, 20.5.-24.5. 2002
8. Havlas Z., Michl J.: Spin-Orbit Coupling in Carbenes and Biradicals, Photochemistry, Cordoba, duben 2002.
9. Havlas Z., Michl J., Chalupský J., Tonne J., Prinzbach H.: Calculations of electronic spectra of parallel benzene dimer model. WATOC02, Lugano, srpen 2002.
10. J. Weber, J. Mesters, M. Lepsik, J. Prejdova, M. Svec, J. Sponarova, P. Mlcochova, K. Strisovsky, T. Uhlikova, M. Soucek, L. Machala, M. Stankova, J. Vondrasek, H. G. Kraeusslich, R. Hilgenfeld and J. Konvalinka: Broad inhibition of multiresistant HIV-1 protease variants by an inhibitor with an unconventional binding mode. EJB,vol. 269,supplement 1, Oct. 2002
11. M. Horn, M. Baudys, Z. Voburka, I. Kluh, J. Vondrasek, M.Mares.: Free-Thiol Cys331 Is critical for Native Tetramer Structure of Cathepsin C (Dipeptidyl Peptidase I). EJB,vol. 269,supplement 1, Oct. 2002
12. Cígler P., Lepšík M., Král V.: Design of Novel Structural Types of Hetero- and Macrocyclic HIV Protease Inhibitors. Book of Abstracts, 9<sup>th</sup> Blue Danube International Symposium on Heterocyclic Chemistry, Tatranska Lomnica, Slovakia, 2002, p. 105.
13. Martin Švec, Kvido Stříšovský and Jan Konvalinka: Kinetic and Structural Characterization of Two Active Forms of Aspartic Proteinase from Murine Intracisternal A-type Particles. EJB,vol. 269,supplement 1, Oct. 2002

## Studenti

1. EURESCO konference "Molecules of Biological Interests" in the Gas Phase", Kreuth, SRN (21. – 26.7.2002) poster "Formic and Acetic Acid Dimers: Potential and Free Energy Surfaces", Jana Chocholoušová
2. EURESCO konference "Molecules of Biological Interests" in the Gas Phase", Kreuth, SRN (21. – 26.7.2002) poster "Towards True Stabilization Energies of H-bonded and Stacked DNA Base Pairs", Petr Jurečka
3. EURO WINTERSCHOOL "Quantum Simulations of Complex Many – Body Systems: From Theory to Algorithms", Rolduc Conference Centre, The Netherlands (25.2-1.3. 2002) poster "Glycine Dimer: Potential and Free Energy Surface", Jana Chocholoušová
4. EURESCO konference "Zeolite Molecular Sieves" , Obernai, France, (15. – 20.3.2002), Markéta Davidová, poster "Computational study of properties of copper ions in zeolites"
5. Quantum dynamics and spectroscopy of the Cl...H<sub>2</sub>O complex, Quantum dynamical concepts: >From diatomics to biomolecules. International conference and school. Dresden, Germany, 2. 4. - 3. 5. 2002, Martina Roeselová a Martin Mucha.

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

---

6. Photodissociation and caging of hydrogen halides inside or on the surface of large inert clusters, Quantum dynamical concepts: From diatomics to biomolecules. International conference and school. Dresden, Germany, 2. 4. - 3. 5. 2002, Petr Slaviček.
7. Bound and quasi-bound states of Ne...HBr, 17th International conference on high resolution spectroscopy, Prague, Czech Rep., 1. - 6. 9. 2002, Petr Slaviček.
8. Photodissociation and caging of hydrogen halides in inert clusters. The 2002 conference of younger European chemists, Heidelberg, Germany, 30. 9. - 2. 10. 2002, Petr Slaviček.
9. XXXIV Symposium on catalysis, Praha, (4. -5. 2002), Markéta Davidová, poster "Characterization of the Cu<sup>+</sup> sites in high-silica zeolites interacting with CO molecule: combined computational and experimental study"
10. Pashkin: Submillimeter and far infrared dielectric response of Bi-doped SrTiO<sub>3</sub> ceramics, ECAPD-6, Aveiro, Portugalsko, 2.9.-5.9.2002
11. H. Němec: Terahertz time-domain spectroscopy, DPG-Schule für Physik, Kurs I: Optimal Femtosecond Laser Control of Microscopic Dynamics, Physikzentrum, Bad Honnef, Německo, 22.-27.9. 2002