

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Závěrečná zpráva o realizaci projektu¹

1. Stručný přehled splněných cílů projektu

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

K 1.1.2004 přešla větší část Centra z ÚFCH-JH AV ČR na ÚOCHB AV ČR. Nositelem Centra se stal ÚOCHB AV ČR (řešitel Pavel Hobza) a ÚFCH-JH AV ČR se stal spolunositelem (spoluřešitelem se stal doc. Dr. M. Hof). Tyto organizační změny se nedotkly vědeckého programu Centra a jak vyplývá z dalšího textu, stanovené cíle byly splněny a práce probíhala podle plánu. Můžeme dokonce konstatovat, že výborné pracovní podmínky Centra, zajištěné Ústavem organické chemie a biochemie, nám umožnili dokončit největší počet publikací v historii Centra.

Mezi nejvýznamnější vědecké výsledky Centra za poslední rok patří:

- Bylo dokončeno teoretické studium tautomerizačních rovnováh bází nukleových kyselin, jakož i párování bází nukleových kyselin.
- Na základě molekulových simulací a spektroskopických experimentů byl vytvořen jednotný model povrchů vodných roztoků solí, kyselin a bází, s přímými implikacemi např. pro heterogenní atmosférické procesy.
- Byla dokončena teoretická a experimentální studie interakce molekuly NO a ionty mědi v molekulových sítích.
- Byly vypočteny NMR štěpící konstanty v komplexech kovových kationtů s bázemi DNA.
- Byl popsán reakční mechanismus multi-copper oxidáz metodami QM/MM.
- Byla změřena a interpretována femtosekundová dynamika fotoexcitovaných laserových barviček v polárních rozpouštědlech.
- Byla změřena a vysvětlena kinetika tvorby fosfolipidových membrán na hydrofilních površích.

Podrobněji jsou všechny vědecké výsledky uvedeny níže u jednotlivých pracovišť Centra. Významným způsobem se v posledním roce prohloubila spolupráce mezi jednotlivými skupinami a pracovišti Centra, zejména mezi teorií a experimentem, o čemž mimo jiné svědčí výrazný nárůst počtu společných publikovaných a zasláných prací. Poslední rok činnosti Centra je logicky nejproduktivnějším rokem, protože můžeme plně využít skvělé možnosti dané existencí Centra. Jsme velmi rádi, že můžeme konstatovat, že publikační aktivita členů Centra je v tomto roce nejvyšší. V roce 2004 jsme publikovali rekordní počet 75 původních prací (dalších 14 prací je v tisku) v předních světových časopisech s vysokým impact faktorem. Například, 6 prací v *J. Am. Chem. Soc.* (přičemž souhrnný počet letošních prací v tomto časopisu od všech autorů majících adresu v ČR je 11), 8 prací v *J. Phys. Chem.*, 3 práce v *J. Chem. Phys.*, 11 prací v *Phys. Chem. Chem. Phys.* a 3 práce v *Chem. Phys. Letters*.

¹ Zpráva podepsaná řešitelem, která byla schválena oponentním řízením, se současně se zápisem z oponentního řízení, vyúčtováním za uplynulé období, se zasílá písemně i elektronicky zadavateli.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Těžištěm vědecké práce Centra je základní výzkum. Část projektu (biochemická a biofyzikální část) však po celou dobu trvání Centra směřovala k biomedicínalním aplikacím. Výpočty interakcí DNA a RNA s léčivými látkami přispívají k výstupům v aplikační sféře. V experimentální oblasti se podařilo objevit nové možnosti mikroskopie v blízkém poli v daleké infračervené spektrální oblasti s možností aplikací pro zobrazování biologických (včetně in-situ) a chemických materiálů, patent v přípravě.

Centrum se stále více profiluje nejen jako špičkové vědecké ale i pedagogické pracoviště. V rámci Centra byl akreditován nový magisterský a doktorský program „Modelování chemických vlastností nanostruktur a biostruktur“ na PřF UK. V červnu letošního roku proběhly přijímací pohovory do 1. ročníku tohoto doktorského studijního programu, který byl zahájen 1.10.2004.

Počet postgraduálních studentů a diplomantů v Centru je stále vysoký. Je to nejen díky zajímavé vědecké tematice, ale také díky naší aktivní činnosti zaměřené nejen na naše, ale i zahraniční studenty. Pro studenty a hosty Centra pořádáme pravidelné semináře (v anglickém jazyce). V září letošního roku jsme zahájili společné semináře s částí Centra lokalizované již dříve na ÚOCHB (skupina Dr. Havlase). Semináře pořádáme na našem pracovišti Na Santince a každého semináře se účastní okolo 50 pracovníků a studentů Centra. Atmosféra seminářů je velmi pracovní a inspirující a toto pokládáme za splnění jednoho z cílů Centra. V období od 30.8. do 3.9.2004 jsme přímo v prostorách Centra Na Santince uspořádali 3. Ročník Letní školy teoretické a výpočetní chemie. Kromě studentů Centra se letní školy zúčastnilo celkem 31 účastníků z České a Slovenské republiky (18 studentů magisterského studia, 10 studentů doktorantského studia, dva asistenti a jeden profesor z českých univerzit). Přednášky na Letní škole byly plně zajištěny pracovníky Centra a pokrývaly oblast od úvodu do kvantové chemie až po aplikace kvantově mechanických a molekulově dynamických metod při studiu komplexních systémů a biomolekul.

Na půdě Centra začali pracovat zahraniční studenti: postdoc z Polska W. Zierkiewicz a Španělska H.V. Gonzales (držitelka velmi prestižního stipendia European Molecular Biology Organization), doktorandi z Polska I. Dabkowska (držitelka Visegrad stipendia), doktorand Babak Minofar z Iranu, doktorand T. Frigato z Itálie a na měsíční stáži byl Moise Dongmo z Kamerunu. Ve skupině Martina Hofa (spoluřešitel 3) začali pracovat dva doktorandi (A. Olzyska a A. Miszta) a dva vědečtí pracovníci (P. Jurkewicz a Dr. T. Kral) z Polska. Naše Centrum se stalo cílem nejen studentů a postdoců, ale také i profesorů zahraničních univerzit, kteří u nás pracují v rámci „sabbatical“ pohyťů. V létě letošního roku tak zde pobýval Prof. S. Golombek z University of Sao Paolo, Brazílie a Doc. Dr. Norbert Klein, FZ Jülich, Německo. Další zahraniční kolegové navštívili krátkodobě Centrum a proslavili zde přednášku.

Kmenoví pracovníci Centra jsou zváni k proslovení přednášek na prestižní mezinárodní konference a zahraniční univerzity. Naší snahou je umožnit aktivní účast na konferencích i studentům, a to i přes značné finanční náklady s tím spojené. Studenti centra v roce 2004 proslavili celkem 7 přednášek a prezentovali 7 posterů na mezinárodních konferencích. Naši pracovníci jsou také pověřeni organizací mezinárodních konferencí (V. Špirko a O. Bludský

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace:: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

– „High resolution spectroscopy conference“, Praha 2004, Petr Nachtigall – 3rd FEZA Conference, Praha 2005, Pavel Jungwirth – International workshop on ions at aqueous interfaces, Praha, 2005, Pavel Hobza –EURESCO konference, Třešť 2006).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

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

Nositel: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Studium bází DNA a RNA. Byly provedeny přesné výpočty stabilizačních energií párů bází nukleových kyselin v desítkách nejrůznějších struktur, jak ve vakuu, tak v geometriích vzatých z experimentálních studií – z krystalové rentgenostrukturní analýzy a nukleární magnetické rezonance. Prozkoumány byly jak obvyklé typy interakcí, tak méně časté motivy, vyskytující se např. v ribozomální RNA. Srovnáním těchto přesných dat s výsledky empirických potenciálů jsme potvrdili správnost empirického popisu většiny systémů, ale také našli typické situace, ve kterých selhávají. Podobně umožnily naše referenční výpočty i ověření kvality některých běžně používaných metod jako je DFT.

Dokončili jsme studium tautomerizačních rovnováh bází nukleových kyselin (thymin, uracil, thiouracil).

Po dlouhém úsilí při studiu excitovaných stavů bází nukleových kyselin jsme konečně úspěšně dokončili studii excitovaných stavů guaninu a 7-methyl- a 9-methylguaninu.

Mikrohydratace párů bází zásadně ovlivňují strukturu párů; jde o změnu z planárního až po patrové uspořádání. Ukončili jsme studie párů adenin...thymin a guanin...cytosin.

Na základě systematických kvantově chemických výpočtů byla provedena detailní analýza rozdílu vazby dvojmocného zinku a hořčíku k bázím nukleových kyselin, a tyto výsledky byly korelovány s vazbou těchto iontů v DNA a RNA.

Byla publikována studie lokální deformability párů bází v dvoušroubovici DNA metodou počítačových simulací.

Byla popsána struktura valenčního a dipólově vázaného aniontu thyminu.

Byly vypočteny NMR parametry v komplexech kovového kationtu a báze molekuly DNA pro různé specifické vazebné motivy na jejichž základě lze jednotlivé vazebné motivy od sebe odlišit. Pro zmíněné komplexy byla dále provedena energetická studie s cílem navrhnout vazebný motiv kovového kationtu v nativním prostředí. Dále byla provedena konformační analýza furanosových derivátů pomocí výpočtů NMR spin-spinových štěpicích konstant.

Ve spolupráci s laboratoří Prof. Jane Richardson z Duke University a Prof. Helen Berman z Rutgers University pracujeme na zpřesnění strukturních charakteristik a klasifikace krátkých RNA fragmentů.

Struktury dinukleotidových fragmentů nalezených v ribosomální RNA byly energeticky relaxovány.

Internetová služba, která klasifikuje RNA dinukleotidy na základě znalosti struktur 32 dinukleotidových fragmentů, je plně funkční a dokončuje se její zprovoznění na serveru Nucleic Acid Database.

Ve spolupráci s Dr. Trantírkem z JČU České Budějovice probíhají rozsáhlé studie vztahů mezi parametry měřitelnými technikami NMR a strukturou nukleových kyselin a to na různých úrovních modelu, včetně uvážení mikrohydratace v různých rozsazích.

Modelování aminokyselin a proteinů. Byla zahájena studie konformačních stavů krátkých peptidů v plynné fázi a rotamerních stavů aminokyselin s přihlédnutím ke stabilizující interakci postranního řetězce s peptidovou vazbou.

Byl objasněn růst enzymatické aktivity v alkoholdehydrogenase po substituci nativního zinku iontem kobaltu.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Za použití kombinovaných metod QM/MM (kvantová mechanika/molekulová mechanika) byl teoreticky prozkoumán a popsán reakční mechanismus celé třídy enzymů - tzv. Multi-copper oxidáz s důrazem na strukturní charakterizaci dvou popsaných intermediátů.

Modelování biologických membrán. Byla dokončena teoretická studie týkající se hydratace biologické membrany, konkrétně molekuly methylfosfocholinu. Ukázali jsme, že mikrohydratace vede k dramatické změně struktury molekuly, která se projeví změnou IR spektra systému (modrý posun vazebných C-H vibrací). Naše studie plně vysvětlila experimentální pozorování učiněné našimi kolegy na Univerzitě v Jeně.

Studium vodíkových vazeb. Dále pokračovalo studium nepravé vodíkové vazby. Vyšetřili jsme rozsáhlý soubor komplexů s pravou i nepravou vodíkovou vazbou s cílem najít příčinu odlišného spektroskopického chování. Odpověď není jednoznačná a za odlišné chování odpovídá souhra několika charakteristik. Bylo zahájeno studium vodíkové a nepravé vodíkové vazby v elektronicky excitovaném stavu na modelových systémech.

Izomerizační dynamika. Byly studovány izomerizační procesy na modelovém radikálu MgNC/MgCN a navrženy možnosti optického řízení izomerizačních reakcí.

Solvatace iontů a molekul. Na základě molekulových simulací a spektroskopických experimentů byl vytvořen jednotný model povrchů vodních roztoků anorganických solí, bází a kyselin.

Byla studována hydratace monokarboxylových (formát, acetát) a dikarboxylových dianiontů (oxalát, adipát, suberát, a benzendikarboxylát) ve vodních klastrech a na rozhraní voda-vzduch ve spolupráci s experimentátory v PacificNorthwest National Lab.

V přímé spolupráci s experimentátory (Max Born Institute, Berlin) bylo studováno chování iontových surfaktantů (např. tetra-butyl amonium) na rozhraní voda-vzduch.

Byla modelována adsorpce atmosféricky relevantních plynů (dusík, kyslík, ozón, OH a další) na vodních kapkách.

Studium molekulových sítí. V oblasti studia interakce molekul s kovovými kationty v mimomřížkových pozicích v zeolitech bylo kromě kombinované kvantově mechanické/molekulově mechanické metody nově využita i periodická DFT metoda. Byla významně prohloubena spolupráce s experimentálním pracovištěm na univerzitě v Pardubicích – byla vyvinuta kombinovaná experimentální a teoretická metodika (teplotní programová redukce a IČ) k charakterizaci mimomřížkových iontů Cu⁺ v zeolitech. Metoda pro výpočty vibračních frekvencí adsorbovaných molekul vyvinutá v předchozím roce byla úspěšně aplikována na další systémy. Vibrační dynamika „probe“ molekul adsorbovaných na bazických zeolitech byla teoreticky popsána se spektroskopickou přesností. Byla dokončena studie interakce NO s jednomocnými ionty mědi v zeolitech.

Modelování spin-orbitálních efektů. Byl studován vliv konformace obou methylenových funkcí m-xylylenu na parametry D a E jemného štěpení jeho základního tripletu v nulovém poli. Byla ověřena teoretická možnost použít dvojici nepárových elektronů tohoto 1,5-biradikálu jako experimentální sondu poskytující informaci o odchylce rovnovážné struktury

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

derivátů m-xylylenu (nesoucích objemné substituenty na obou methylenových funkcích) od původně optimální struktury planární.

Byly vypočteny parametry jemného štěpení základních (nejnižších) tripletových stavů disubstituovaných kationtů nitrenia, fosfena a arsenia, jakož i řady heterocyklických arylnitrenů a možných produktů jejich intramolekulárních přesmyků. Všechny tyto látky nebo jejich substituční deriváty představují reakční meziprodukty řady organických chemických reakcí. Přibližná znalost vybraných spektrálních parametrů pak slouží experimentátorům při jejich snaze o izolaci a charakterizaci těchto vysoce reaktivních látek v pevných maticích a sklech při velmi nízkých teplotách.

Do počítačového programu pro výpočet spinově závislých relativistických vlivů byl implementován dvoelektronový variačně stabilní spin-orbit Hamiltonián plynoucí z tzv. „free-particle“ Foldyho—Wouthuysenovy transformace Diracova-Coulombova-Breitova čtyřsložkového Hamiltoniánu. Nahrazení původního (jednoduššího) Breitova-Pauliho spin-orbit Hamiltoniánu nám spolu s implementací DKH2 (Douglasova-Krolova-Hessova) jedoelektronového bezspinového Hamiltoniánu (s přesností do druhého řádu) pro zahrnutí spinově nezávislých relativistických vlivů umožnilo počítat energii spin-orbitální vazby i v molekulách obsahujících těžší atomy (zhruba až po jód).

Byly studovány interakce karboranů (CB₁₁) s kationy kovů, s přechodnými kovy a oxidačně-redukční vlastnosti karboranů, fluoro- a trifluoromethyl-karboranů.

Zahraníční cesty, stáže a pobyty (bez názvu přednášky, která je uvedena v seznamu přednášek, příloha I). Účast na konferenci byla vždy spojena s prezentací výsledků Centra.

Vědečtí pracovníci

Pavel Hobza

- Plenární přednáška a „Vice-chair“ na EURESCO konferenci „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK
- Plenární přednáška na konferenci „Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2004)“, Gyeongju, Korea
- Plenární přednáška na konferenci „Raman and IR Spectroscopy in Biology and Medicine“, Jena, Německo
- Plenární přednáška na konferenci „The Nature of Hydrogen Bonding and Density Functional Theory“, Lyon, Francie
- Plenární přednáška na konferenci „Electronic Structure: Principles and Applications“, Valladolid, Španělsko
- Třítýdenní pobyt a přednáška na University of California, Santa Barbara, USA
- Přednáškové turné na univerzitách ve státě Sao Paulo, Brazílie
- Zvaná přednáška na Freie Universität Berlin

Pavel Jungwirth

- Zvaná přednáška na „Workshop on short range interactions in soft condensed matter“, Regensburg, SRN.
- Zvaná přednáška na „International conference on physical chemistry“ Hobart, Austrálie a přednáškové turné na univerzitách na Novém Zélandu.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

- Zvané přednášky na konferenci „227th ACS National Meeting“, Anaheim, USA.
- Zvaná přednáška na „Workshop on ice, icy surfaces, and icy particles“, Teluride, USA.
- Zvaná přednáška na „Gordon research conference on water and aqueous solutions“, Plymouth, USA.
- Tříměsíční pracovní pobyt na University of California at Irvine, přednáškové turné na Ohio State University, University of Colorado at Boulder, University of Georgia at Athens a Pacific Northwest National Laboratory.
- Zvaná přednáška na Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Potsdam, SRN.

Vladimír Špirko:

- Zvaná přednáška na Ibaraki University, Japan.
- Zvaná přednáška na Okayama a Kyushu University, Japan.
- Zvaná přednáška na Advanced Industrial Science & Technology Institute, Tsukuba, Japan.

Jiří Šponer:

- Zvaná přednáška na EURESCO konferenci „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK, duben 2004.

Petr Nachtigall:

- Přednáška na International zeolite conference, South Africa.
- Zvaná přednáška v Institute of Chemical Technology, Valencia, Španělsko.
- Zvaná přednáška na Universidad des las Islas Belears, Palma de Mallorca, Španělsko.

Dana Nachtigalová:

- Zvaná přednáška na Universidad des las Islas Belears, Palma de Mallorca, Španělsko.
- Poster na International zeolite conference, South Africa.

Martin Kabeláč

- Poster na EURESCO konferenci „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK

Daniel Svozil

- Poster na EURESCO konferenci „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK

Petra Žďánská

- Zvaná přednáška na „Israel chemical society meeting“, Sde Boker, Israel a na Technion, Haifa.

Martina Roeselová

- Pokračování pracovního pobytu na University of California, Irvine, USA (srpen 2003 – červenec 2004)
- Týdenní pracovní pobyt a přednáška na Ohio State University, Columbus, USA
- Poster na konferenci „21st Symposium on Kinetics and Photochemical Processes in the Atmosphere“, Fullerton, California, February 24, 2004

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

- Zvaná přednáška na konferenci „227th ACS National Meeting, Division of Computers in Chemistry“, Anaheim, California, March 28 – April 1, 2004
- Přednáška na konferenci „59th Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy“, Columbus, Ohio, June 21-25, 2004
- Přednáška na konferenci „CRC Workshop on Chemistry at Interfaces“, Newport Beach, California, June 29, 2004

Wiktor Zierkiewicz

- Poster na EURESCO konferenci „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK

Vladimír Sychrovský

- Poster na konferenci „40th Symposium for Theoretical Chemistry“, Suhl, Německo, září 2004
- Poster na konferenci „VIth Central European NMR Symposium“, Linec, Rakousko, září 2004

Studenti

Jan Honzíček

- Poster na konferenci „4th International Symposium on Chemistry and Biological Chemistry of Vanadium, Szeged, Hungary, 3.-5.9.2004

Eva Mrázková

- Poster na konferenci „Raman and IR Spectroscopy in Biology and Medicine“, March 1-2, 2004, University of Jena, Germany

Jiří Černý

- Poster na EURESCO konferenci „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK
- Studijní pobyt na Univerzitě ve Paderbornu, SRN, 1.-7.11.2004

Jaroslav Rejnek

- Studijní pobyt na Univerzitě ve Paderbornu, SRN, 1.-7.11.2004

Tomáš Kubař

- Studijní pobyt na Univerzitě ve Paderbornu, SRN, 1.-7.11.2004

Martin Mucha

- Zvaná přednáška na konferenci „227th ACS National Meeting“, Anaheim, USA.

Luboš Vrbka

- Zvaná přednáška na Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Potsdam, SRN.
- Zvaná přednáška na Max Born Institute, Berlin, SRN.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Petr Jurečka

- Stáž na univerzitě v Paderbornu, Německo, téma: Parametrizace metody DFTB, 24.11.2004-20.12.2004

Martin Šilhan

- Studijní pobyt na Vídeňské univerzitě, Rakousko, 1. 1. – 28. 2. 2004.
- Účast na konferenci „Time-Dependent Density Functional Theory and the Dynamics of Complex Systems“, Santa Fe, USA, červen 2004.

Organizace konferencí

Bohdan Schneider

- Třetí setkání českých a slovenských strukturních biologů, Nové Hrady, 11.-13. března 2004, <http://www.xray.cz/setkani/>. 75 účastníků, 12 z ciziny.

Ota Bludský a Vladimír Špirko

- Mezinárodní konference „High resolution molecular spectroscopy“, Praha, 2004, 152 účastníků.

Hosté Centra

1. Prof. Wolfgang P. Kraemer, MPI für Astrophysik, Německo
2. Prof. Sergio Golombek, University of Sao Paolo, Brazílie
3. Prof. Klaus Mueller – Dethlefs, University of York, UK
4. Prof. Mattanjah de Vries, University of California at Santa Barbara, USA
5. Dr. Eric Brown, University of California at Irvine, USA
6. Dr. Bernd Winter, Max Born Institute, Berlin, SRN
7. Prof. Werner Kunz, University of Regensburg, SRN
8. Prof. Victoria Buch, Hebrew university of Jerusalem, Israel.
9. Prof. R. G. Bell, Royal Institution of Great Britain, London, GB.
10. Prof. F. Henn, University of Montpellier, France.
11. Prof. H. Nakatsuji, Kyoto University, Japan.

Výuka na univerzitách

1. *Klasická a kvantová molekulová dynamika*, Pavel Jungwirth, MFF UK Praha, zimní semestr
2. *Teoretická a výpočetní chemie*, Pavel Hobza, PĚF UK Praha, letní semestr
3. *Úvod do kvantové chemie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, zimní semestr
4. *Kvantová chemie - spektroskopie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, zimní semestr
5. *Metody kvantové chemie*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, letní semestr
6. *Aplikace kvantově chemických metod*, Petr Nachtigall, FCHT, Univerzita Pardubice, letní semestr.
7. *Počítačové simulace biomakromolekul*, Jaroslav Vacek, MFF UK Praha, BCM 302, zimní semestr

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

8. *Teoretická a výpočetní chemie - cvičení*, Eva Mrázková a Tomáš Kubař, PřF UK Praha, letní semestr
9. *Obecná chemie*, Eva Mrázková a Tomáš Kubař, cvičení pro studenty, PřF UK Praha, zimní semestr
10. *Bioinformatika*, Jiří Vondrášek, PřF UK Praha, zimní semestr
11. *Metody stanovení a popisu molekul*, Bohdan Schneider, MFF UK Praha, semestrální kurs
12. *Výpočetní experimenty v teorii molekul I*, Bohdan Schneider, MFF UK Praha, klasifikovaný zápočet
13. *Databáze molekulových struktur jako nástroj chemie a biologie*, Bohdan Schneider, PF MU Brno, semestrální kurs.

Popularizace vědy

Všichni pracovníci Centra – Popularis v ČT Pořad o UOCHB.

Pavel Jungwirth – televizní dokument „Život mladého vědce“ (bude vysílán v lednu 2005),

Pavel Jungwirth – účast na rozhlasové diskuzi o vědě (BBC Praha)

Eva Mrázková - spoluautor článků do ABC – „Za tajemstvím molekul“ (24 dílů)

Eva Mrázková - spoluautor zadání úloh z fyzikální chemie pro ChO na školní roky 2004/2005 a 2005/2006

Eva Mrázková – mentor na 36. ročníku IChO, Kiel, Německo

Tomáš Kubař - spoluautor zadání úloh z fyzikální chemie pro ChO na školní roky 2005/2006
Spoluorganizace Dnů otevřených dveří ÚOCHB

Spolunositel 1: VŠCHT

Byly simulovány termodynamické vlastnosti těžkých vzácných plynů (argon, krypton, xenon) v oblasti plynu a kapaliny za vysokých tlaků pomocí metody Monte Carlo v kanonickém souboru. Práce navazuje na přesné *ab initio* výpočty párových potenciálů.

Byla navržena nová metoda výpočtu chemických potenciálu složek založená na kombinaci počítačových experimentů a teoretických vazných podmínek.

Byla navržena nová metoda molekulově-dynamických simulací beroucí v úvahu polarizovatelnost molekul.

Byly vypočteny globální fázové diagramy pro van der Waals-Dieterici a BMCSL-Dieterici stavové rovnice.

Na základě počítačových simulací a přesných viriálních koeficientů byla navržena nová stavová rovnice platná v oblasti tekutiny a v metastabilní oblasti. Byl proveden rozbor termodynamického chování v metastabilním a nestabilním oboru.

Teorie funkcionálu hustoty (DFT) a teorie fundamentální míry (FMT) byly použity k výpočtu fázového chování binárních směsí v modelových pórech.

Byla studována vnitřní struktura vody za použití realistických modelů uvažujících jak multipólové momenty, tak polarizovatelnost.

Byly studovány dodatkové objemy modelových směsí tuhých částic metodami integrálních rovnic. Byla navržena nová metoda řešení Ornsteinovy-Zernikeho rovnice. Výsledky byly porovnány s hodnotami plynoucími z pseudoexperimentů a ze stavových rovnic.

Konference, stáže a zahraniční pobyty

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

1. Magda Francová, Anatol Malijevský, Jiří Kolafa, and Stanislav Labík: The bridge function of hard spheres as a function interparticle distance and density. 18th IUPAC international conference on chemical thermodynamics. August 17-21, Beijing, China.
2. Stanislav Labík, Jiří Kolafa, and Anatol Malijevský: Monte Carlo integration for the virial coefficients of hard spheres and hard discs up to the ninth. 18th IUPAC international conference on chemical thermodynamics. August 17-21, Beijing, China.
3. Jiří Kolafa : Nonanalytical equation of state of the hard sphere fluid. 18th IUPAC international conference on chemical thermodynamics. August 17-21, Beijing, China.
4. Jiří Kolafa, Stanislav Labík, and Anatol Malijevský: Radial distribution function of the hard sphere fluid. 18th IUPAC international conference on chemical thermodynamics. August 17-21, Beijing, China.
5. Magda Francová, Anatol Malijevský, Jiří Kolafa, and Stanislav Labík: The bridge function of hardspheres as a function of interparticle distance and density, Liquid Matter workshop:Molecular Physics of Liquids October 8, Trest October 8, Trest.
6. Pavel Morávek Jiří Kolafa, Tomáš Hujo, and Stanislav Labík: Excess volumes of diatomic mixtures - computer simulations and integral equations, Liquid Matter workshop:Molecular Physics of Liquids October 8, Trest October 8, Trest.
7. Tomáš Hujo, Jiří Kolafa and Stanislav Labík: The chemical potentials of hard disk fluids. Liquid Matter workshop:Molecular Physics of Liquids October 8, Trest October 8, Trest.
8. Anatol Malijevský: Hard spheres. November 9th. Invited lecture, University of Regensburg, Germany.
9. Alexandr Malijevský - Universidad Extremadura, Badajos, Španělsko, dvouměsíční studijní pobyt (květen - červen 2004).
10. Alexandr Malijevský: Density functional theories for liquids and their mixtures. Universidad Extremadura, Badajos, Spain.

Popularizace vědy

- V rámci popularizačního poslání Centra vyšla kniha I. Malijevská, A. Malijevský, J. P. Novák: *Záhady, klíče zajímavosti očima fyzikálních chemie*, VŠCHT, duben 2004. Kniha měla mezi studenty, jejich pedagogy a dalšími zájemci o popularizaci přírodních věd mimořádný ohlas na 10. Mezinárodním knižním veletrhu SVĚT KNIHY Praha. Byla oceněna Zvláštní cenou poroty CHEMTEC 2004 za přínos k popularizaci chemie.
- Účastníme se pravidelně Letního odborného soustředění chemické olympiády v Běstvině. Letos (18. Letní škola: Inženýrská chemie na počátku 21. století) zde přenesl J. Kolafa přednášku *Struktura vody z molekulárního pohledu*.
- Pracoviště se rovněž pravidelně účastní Letní školy středoškolských učitelů chemie pořádané na VŠCHT Praha (letos proběhla koncem srpna).

Hosté centra:

1. Prof. Douglas Henderson. Department of Chemistry and Biochemistry, Brigham Young University, Provo, Utah, USA.
2. Doc. Thomas Kraska, Institute of Physical Chemistry, University at Cologne, Germany.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Samostatné studentské práce:

1. Jan Bumba: The Dieterici-type equations of state: comparison and the global phase diagrams, doktorská disertační práce, listopad 2004.
2. Magda Francová: Můstková funkce v teorii integrálních rovnic, Diplomová práce, červen 2004.
3. Pavel Morávek: Excess volume of homonuclear diatomic mixtures, Students research conference, FCHI, VŠCHT Praha, November 2004.
4. Tomáš Hujo: Calculation of the chemical potentials of components of hard-disk fluids by computer simulations. Students research conference, FCHI, VŠCHT Praha, April 2004.

Výuka na univerzitách

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
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. Al. Malijevský: Seminář předmětu počítačové simulace pro studenty magisterských a doktorských studijních programů.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Spolunositel 2: Fyzikální ústav AV ČR

Byly studovány mechanismy generace volných elektronů v atmosférických plynech (O₂, N₂, Ar) pomocí mnohofotonové optické excitace a pomocí tunelování ve vysokém poli (excitace vlnovou délkou 400 a 800 nm) a dynamika takto vytvořeného plazmatu pomocí interakce s THz zářením. Výsledky experimentů poskytují informace o elektronových hladinách v plynech, o změnách elektrického potenciálu molekul ve vysokém střídavém poli a o distribuci elektronového plazmatu. Publikace je v přípravě.

Pro umožnění experimentů podobného typu v kapalinách jsme zavedli nové uspořádání pro studium kapalných vzorků ve formě volně padajícího proudu kapaliny (wire-guided free-jet); experimenty probíhají.

Byla změřena a interpretována ultrarychlá dynamika fotoexcitovaných molekul TBNC v různých polárních rozpouštědlech. Mikroskopická interpretace výsledků je založena na tvorbě klastrů a polykrystalické fáze chromoforu v roztoku vlivem osvětlení. Fenomenologicky byla data interpretována pomocí níže uvedené metodologie a modelu excitovaných tlumených oscilátorů.

Byla vyvinuta, popsána a experimentálně ověřena nová metodologie časově rozlišených měření v daleké infračervené oblasti. Umožňuje popis ultrarychlých změn THz spekter pomocí nerovnovážné 2D susceptibility a zpracování a interpretaci dat pomocí analytických modelů.

Bylo vyvinuto nové experimentální uspořádání umožňující charakterizaci tenkých fotoexcitovaných vrstev (tzv. THz time-of-flight spectroscopy).

Byla objevena nová metoda generace THz záření pomocí optického usměrnění na povrchu kovů. Tato metoda se ukazuje perspektivní pro studium či detekci ultratenkých adsorbovaných molekulárních vrstev.

Byly podniknuty první kroky, které experimentálně prokázaly novou možnost THz mikroskopie v blízkém poli. Vzhledem k velké citlivosti metody na přítomnost vody zahrnují potenciální aplikace zobrazování biologických a chemických systémů. (patent a publikace v přípravě; metoda se dále rozvíjí).

Zahraníční cesty, stáže a pobyty

Vědečtí pracovníci

Petr Kužel

- Zvaná přednáška na International conference LEES04, Kloster Banz, Německo
- Zvaná přednáška a třídní pracovní pobyt na Universitě Bordeaux I, Francie.

Filip Kadlec

- Přednáška na Joint 29th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 12th International Conference on Terahertz Electronics, Karlsruhe, Německo.
- Poster na Joint 29th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 12th International Conference on Terahertz Electronics, Karlsruhe, Německo
- Dvoudenní pracovní pobyt na Universitě de Savoie, Francie

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace:: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Studenti:

Hynek Němec

- Přednáška na Joint 29th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 12th International Conference on Terahertz Electronics, Karlsruhe, Německo

Martin Kempa

- Přednáška na XVI Polish-Czech Seminar and School on Polymers and composites for microelectronics and robotics (PCMR), May 10-13 2004, Great Mazurian Lakes

Samostatné studentské práce:

A. Pashkin obhájil disertační práci s názvem „Terahertz spectroscopy of ferroelectrics and related materials“. V rámci této práce zejména výrazně obohatil experimentální možnosti výzkumné skupiny o fázově citlivou metodu měření odrazivosti.

Hosté Centra

1. Doc. Dr. Norbert Klein, FZ Jülich, Německo
2. Dr. Patrick Mounaix, Université Bordeaux I, Francie
3. Prof. A. Apkarian, University of California, Irvine, USA

Popularizace vědy

Prezentace experimentálních možností Centra (nelineární jevy a časově-rozlišená terahertzová spektroskopie) na dni otevřených dveří AVČR, 11. až 13. 11. 2004.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Spolunositel 3: Ústav fyzikální chemie JH AV ČR

Za nejvýznamnější vědecké úspěchy dosažené v roce 2004 považujeme:

V renomovaném nakladatelství Springer byla publikována kniha *Fluorescence Spectroscopy in Biology*, jejímž hlavním editorem je Martin Hof.

Byla změřena a vysvětlena kinetika tvorby fosfolipidových membrán na hydrofilních površích (slída, sklo, oxidovaný křemík) pomocí elipsometru, který byl zakoupen tento rok.

Byla studována adsorpce závislá na potenciálu a laterální pohyblivost DOPC na polykrystalu zlata s využitím fluorescenční mikroskopie a EQCM.

Experimentálně i teoreticky byla mapována relaxace solventu v oblasti hydrofobních řetězců mastných kyselin v biomembránách (spolupráce Hof - Jungwirth).

Byla implementována nová experimentální metoda „Časově rozlišená fluorescenční korelační spektroskopie“ a naprogramován software na zpracování takto získaných dat.

Bylo provedeno studium kondensace DNA způsobované kladně nabitými liposomy pomocí fluorescenční korelační spektroskopie.

Výuka na univerzitách

1. Molecular physics, Martin Hof, FJFI CVUT, Praha, letní semestr
2. Fluorescence spectroscopy: principles and biological applications, Martin Hof, FJFI CVUT, Praha, zimní semestr
3. Spectroscopy, Martin Hof, University of Olomouc, zimní semestr
4. Fyzikální chemie, Jana Humpolíčková, cvičení pro studenty, PřF UK Praha, letní semestr
5. Obecná chemie, Jana Humpolíčková, cvičení pro studenty, PřF UK Praha, zimní semestr

Ocenění

Martin Hof se stal členem redakční rady časopisu: “Journal of Fluorescence“

Zahraniční cesty, stáže a pobyty

Vědečtí pracovníci

Martin Hof

- Zvaná přednáška MEMPHYS - Center for Biomembrane Physics, Odense, Denmark, 26.5.2004
- Zvaná přednáška University of Copenhagen, Department of Pharmaceutics, Copenhagen, Denmark, 27.5.2004
- Plenární přednáška „Advanced Practical Course on Optical Spectroscopy in Biology““, KFZ Juelich, Germany, October, 11th-13th, 2004
- Zvaná přednáška, Katholic University Leuven, Belgium, December, 8th, 2004

Teresa Kral

- „World Conference on Magic Bullets, Nuernberg, Germany, September 9-11., 2004.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace:: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Studenti

Aleš Benda

- Studijní pobyt na CARIM University Maastricht (Nizozemí) 6.-14.2.2004
- Konference The 7th International Carl Zeiss sponsored Workshop on FCS and Related Methods, Dresden (SRN) 6.-8.10.2004
- Pracovní cesta Berlín (SRN) 8.-11.12.2004

Martin Beněš

- Studijní pobyt na CARIM University Maastricht (Nizozemí) 1.-28.2.2004

Jan Sýkora

- Studijní pobyt na KU Leuven, Belgie, 13.10.-13.12.2004

Jana Humpolíčková

- Konference 18th ECIS, 19.-24.9. 2004
- Studijní pobyt na KU Leuven, Belgie, 13.10.-13.12.2004

Organizace konferencí

Byla organizována konference „2nd Prague Seminar in Biophysics of Lipids“, která se konala tento rok v Praze (Prague, říjen, 2004). Jejím organizátorem byl pracovník Centra Martin Hof.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

2. Personální a organizační zabezpečení činnosti

Centrum má celkem 26 kmenových pracovníků (úvazek 18), 44 studentů PhD (úvazek 39,1) a 4 diplomanty. Průměrný věk všech kmenových pracovníků a studentů je 31 let.

Nositel: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Počet pracovníků: 17, celkový úvazek 11.5

Podíl pracovní kapacity (všichni až na 2 pracovníky 70%) a věkové složení:

Pavel Hobza, 58 let

Vladimír Špirko, 62

Petr Nachtigall, 41

Pavel Jungwirth 38

Jiří Šponer, 40 (kapacita 50%)

Ota Bludský, 40

Jaroslav Vacek, 35

Dana Nachtigallová, 40

Martina Roesselová, 39

Vladimír Sychrovský, 36

Martin Kabeláč, 33

Bohdan Schneider, 47 (kapacita 50%)

Zdeněk Havlas, 53

Jiří Vondrášek, 41

Mojmír Kývala, 36

Daniel Svozil, 33

Luboš Rulíšek (po návratu ze stáže), 32

Zahraniční hosté (celkový úvazek 2.7)

Wiktor Zierkiewicz (8 měsíců, úvazek 100%)

Iwona Dabkowska (12 měsíců, úvazek 100%)

Haydee Valdes Gonzalez (12 měsíců, úvazek 100%)

Studenti PhD, celkem 27 (24x100%, 2x50%, 1x10%), celkový úvazek 25,1

Markéta Davidová, 28

Jana Chocholoušová, 27

David Řeha, 28

Petr Jurečka, 28

Michal Hanus, 29

Alexandr Prokop, 29

Jan Kučera, 27

Martin Šilhan, 26

Jiří Černý, 25

Jaroslav Rejnek, 25

Jindřich Fanfrlík, 23

Jan Řezáč, 24

Shai Ronen, 33

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Martin Mucha, 24
Eva Mrázková, 24
Tomáš Kubař, 25
Lucie Zendlová, 25
Luboš Vrbka, 25
Babak Minofar, 32
Tereza Šedivcová, 24
Jan Honzíček, 23
Lada Bendová, 23
Jakub Chalupský, 24
Adriana Mikulová, 23
Vojtěch Klusák, 25
Martin Švec, 30
Martin Lepšík, 28

Diplomanti (celkem 3)
Robert Vácha, 22
Miroslav Rubeš, 22
Michal Petrov, 22

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů a diplomantů je 31,4 let.

Spolunositel 1: VŠCHT

Kmenoví pracovníci:

Počet pracovníků: 4, celkový úvazek 2,6. Věk pracovníka je za jménem.

Anatol Malijevský, 61
Jiří Kolafa, 46
Stanislav Labík, 53
Alexandr Malijevský, 27

Studenti: (doktorské studium, celkem 7)

Jan Bumba, 27
Magda Francová, 23
Tomáš Hujo, 26
Pavel Morávek, 25
Iva Odvárková, 29
Jan Veverka, 26
Jan Picálek, 23

Průměrný věk pracoviště spolunositele je 31,2 let.

Spolunositel 2: Fyzikální ústav AV ČR

Počet kmenových prac.: 2. Celkový úvazek kmenových pracovníků: 1,4
Petr Kužel, 37

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Filip Kadlec, 33
Kapacita: všichni 70 %

PhD studenti: 4. Celkový úvazek PhD studentů: 1
Alexej Pashkin, 28
Hynek Němec, 25
Martin Kempa, 24
Ladislav Fekete, 23

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 29 let.

Spolunositel 3: Ústav fyzikální chemie JH AV ČR

Počet pracovníků: 3, celkový úvazek 2,5
Podíl pracovní kapacity a věkové složení:
Martin Hof, 42
Teresa Kral, 39 (50% od června 2004)
Piotr Jurkewicz, 27 (od dubna 2004)

kapacita: všichni 70%

Studenti PhD (celkem 6)
Martin Beneš, 28
Jan Sýkora, 28
Aleš Benda, 25
Jana Humpolíčková, 25
Adam Miszta, 24 (od října 2004)
Agnieszka Olzyska, 25 (od října 2004)

Diplomanti:
Veronika Fagulová, 23 (od října 2004)

Průměrný věk kmenových pracovníků a PhD. studentů je 29 let.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

3. *Přístrojové vybavení a technické zabezpečení činnosti centra*

Za dobu existence Centra bylo výrazně rozšířeno a zkvalitněno přístrojové vybavení a prostředky výpočetní techniky používané k realizaci cílů Centra. Ve srovnání se stavem před zahájením má Centrum nyní k dispozici:

- výpočetní klastr Steel (21 ks PC dual AMD Athlon MP 1800+, 1.5 GB RAM, 40 GB disk, záložní zdroje, lokální síťové propojení; celkem 42 procesorů)
- výpočetní klastr Titanium (2 ks dual SGI Itanium 733, 10 GB RAM, 72 GB disk, záložní zdroje, lokální síťové propojení; celkem 4 procesory)
- výpočetní klastr Cobalt (40 ks PC Intel Pentium 4 2.80GHz, 1 GB RAM, 120 GB disk, záložní zdroje, lokální síťové propojení; celkem 40 procesorů)
- výpočetní klastr Niob (40 ks PC AMD Athlon XP 3200+, 1 GB RAM, 1200 GB disk, záložní zdroje, lokální síťové propojení; celkem 40 procesorů)
- výpočetní klastr Vanad (16 ks PC Intel Pentium 4 3.00GHz, 1 GB RAM, 80 GB disk, záložní zdroje, lokální síťové propojení; celkem 16 procesorů)
- výpočetní klastr Platinum (14 ks PC dual AMD Opteron Processor 244, 6 GB RAM, 240 GB disk, záložní zdroje, lokální síťové propojení; celkem 28 procesorů)
- server Compaq Alpha ES-40 (4 procesory, 8 GB paměti, 220 GB diskové pole)
- pracovní stanice (desktop) typu PC s procesory Intel Celeron, Intel Pentium III a IV a AMD Athlon (za dobu práce Centra pořízeno cca 30 ks)
- výpočetní klastr Snehurka (10 ks duálních 32-bitových PC, procesory Pentium, AMD, Xeon, paměť 1-4 GB, 8 ks duálních 64-bitových PC s procesory Opteron, paměť 8-16 GB, 80-500 GB disk, 8-procesorový server ALTIX, procesory Itanium 3, 32 GB RAM, 500 GB disk)
- grafické stanice SGI Octan, 3 ks
- klastr 10 dual Pentium 1 GHz a server (9x512MB + 2GB RAM)

Celkem byla tedy kapacita výpočetní techniky sloužící k řešení kvantově chemických a molekulově dynamických úloh v Centru posílena o počítače vybavené celkem 138 dvaatřicetibitovými a 36 čtyřiašedesátibitovými procesory a současně byla značně rozšířena a zkvalitněna výpočetní technika sloužící k běžné práci přímo pracovníkům a studentům Centra. Pro výše uvedené úlohy byly rovněž pravidelně zakupovány a instalovány aktuální verze kvantově-chemických programů.

V průběhu přesunu pracovníků Centra do nového působiště byla dále vybudována lokální počítačová síť na novém pracovišti s kapacitou pro cca 120 stanic (v současnosti zapojeno cca 50 stanic), bezdrátový laserový (SkyLink) a radiový (IEEE802.11b) spoj pro připojení lokální sítě k síti ÚOCHB AV ČR a Internetu, lokální bezdrátová síť pokrývající celou lokalitu nového pracoviště; byly postaveny a zkonfigurovány tiskový a souborový server, poštovní a WWW server a server pro zálohování systémových a uživatelských dat z výpočetních klastrů s celkovou kapacitou 800 GB dat.

Veškeré vybavení, které bylo pořízeno v rámci řešení úloh Centra, je ve velmi dobrém stavu a má perspektivu dalšího mnohaletého intenzivního využívání. Přestože nejstarší pořízené části výpočetních klastrů jsou ve srovnání s výkonem dnešních počítačů zdánlivě zastaralé, jejich stav nadále umožňuje a bude umožňovat jejich další využití pro méně náročné úlohy

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

nebo úlohy, u nichž není doba výpočtu kritická. Veškeré uvedené vybavení je trvale stoprocentně (kromě nutných technologických odstávek) využíváno a je předpoklad dalšího intenzivního využití v budoucnosti.

Nejstarší počítače v ÚOCHB (většina z nich tvořila vstupní vybavení při zakládání Centra) byly převedeny na jiná pracoviště ústavu a ÚOCHB finančně podpořil Centrum prostředky na moderní počítače (Opterony, server ALTIX).

Laboratoř terahertzové spektroskopie (FZÚ AV ČR, **spolunositel 2**) je jediná svého druhu v ČR i ve státech bývalého východního bloku a umožňuje provádět měření na úrovni současné světové špičky. Stěžejní vybavení pro řešení projektu lze shrnout do 2 bodů:

- Zesílený laditelný femtosekundový laserový systém jakožto optický zdroj (jeho pořízení bylo významnou měrou financováno z výzkumného centra v prvním roce řešení projektu)
- V laboratoři vyvinutý THz spektrometr umožňující provádění experimentů v různých konfiguracích (transmisní, reflexní, emisní a pump-probe experimenty) — v tomto směru je unikátní na světě. Interakční komoru lze vyčerpát, měření je možné provádět v širokém teplotním oboru (15–900 K). Jeho využití je multidisciplinární v oblasti fyziky a chemie (analýza rovnovážných dielektrických spekter pevných; ultrarychlá polární dynamika v lokalizovaných i delokalizovaných stavech fotoexcitovaných pevných látek, kapalin a plynů; nelineární interakce na površích; terahertzová mikroskopie).

V laboratoři **spolunositele 3** byly během trvání Centra (2000–2004) vybudovány tyto přístroje:

- Stacionární fluorescenční spektrometr (Fluorolog 3 (Jobin Yvon, France))
- Pikosekundový časově rozlišený spektrometr (kombinace produktů firmy IBH Consultants, UK a PicoQuant, SRN)
- Konfokální mikroskop pro časově rozlišenou konfokální mikroskopii (světový unikátní přístroj postaven na základě přístroje Confocor 1)
- Nulový elipsometr (DRE, SRN)

4. *Spolupráce centra:*

- a) 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. Spolupracujeme zejména s těmito tuzemskými pracovišti: Univerzita Palackého, Olomouc; Anorganický ústav AV ČR; Biofyzikální ústav AV ČR; Univerzita Pardubice; Masarykova Univerzita, Brno a Ostravská univerzita. Kromě pravidelných konzulací pořádá Centrum Letní školy teoretické a výpočetní chemie, kterých se účastní nejen studenti ale i vědečtí pracovníci z různých akademických pracovišť v ČR. Přesunem části Centra z ÚFCH JH na ÚOCHB se prohloubila integrace v biologické a biofyzikální oblasti, jakož i studia nepravé vodíkové vazby. Dokladem o spolupráci jsou společné publikace pracovníků Centra z různých pracovišť.
- b) Jednotliví pracovníci se zapojili do nových mezinárodních projektů v rámci evropské a světové vědecké integrace. Intenzivní spolupráce probíhá v rámci mezinárodního projektu „An integrated approach to understanding the air-water interface in atmospherically relevant systems“ v rámci programu US-NSF "Environmental

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Molecular Science Institute“, 2004-2009. Řešitel projektu spolupracuje v rámci společného NSF grantu na projektu „Structure and properties of DNA base pairs“, 2003-2005. Intenzivní spolupráce je také dokumentována vědeckým pobytem pracovníků Centra na pracovištích v USA a v Evropě. Pokud se týče experimentu, laboratoř THz spektroskopie FZÚ AVČR se stala vyhledávaným partnerem pro spolupráci na perspektivních experimentálních tématech v rámci Evropské unie i v celosvětovém měřítku. Konkrétně se jedná o nové objevy v THz mikroskopii v blízkém poli (spolupráce FZ Jülich), nelineárních interakcí na povrchu kovů (Université de Savoie), dynamiku fotoexcitovaných nositelů náboje (Université Bordeaux) a prostředí se záporným indexem lomu (Université de Savoie, University of California). Druhá experimentální laboratoř (fluorescenční spektroskopie) spolupracuje zejména s pracovišti v SRN (Univerzita Wuerzburg) a Polsku.

- c) Těžištěm vědeckého projektu Centra, zejména jeho teoretické části, je základní výzkum a v současné době nemáme přímé výstupy směrem k aplikační sféře. Část projektu (biochemická a biofyzikální část) však po celou dobu trvání Centra směřovala k biomedicínským aplikacím. V současné době provádíme výpočty interakcí DNA a RNA s léčivy a tyto studie by mohly v blízké budoucnosti vyústit ve výstupy v aplikační sféře. Zaměření centra směřuje jednoznačně k evropské a světové vědecké integraci a toto je patrné z publikačního výstupu, jakož i předešlých částí. Přesto však nezapomínáme na spolupráci v rámci ČR a naše pedagogické a vědecké kontakty na univerzitách v Pardubicích a Olomouci jsou toho dokladem. Dále se nám experimentálně podařilo objevit nové možnosti mikroskopie v blízkém poli v daleké infračervené spektrální oblasti s možností aplikací pro zobrazování biologických (včetně in-situ) a chemických materiálů (patent v případě).
- d) Za velmi důležité považujeme pořádání letních škol a seminářů, kde seznamujeme naše hosty i z regionu a aplikační sféry s našimi výsledky a jednáme o možné spolupráci.

5. Podpora mladých výzkumných pracovníků

- a) Centrum dosáhlo nejvyšší možné integrace Akademie věd s univerzitním systémem: námi připravený magisterský a doktorský studijní program (Modelování chemických vlastností biostruktur a nanostruktur) byl v roce 2003 akreditován na PŘF UK. Odborným garantem programu je řešitel Centra. Naše Centrum je prvním mimouniverzitním pracovištěm v ČR s vlastním magisterským a doktorským studijním programem. První studenti do doktorského studia byli přijati v letošním roce. První studenti do magisterského studia budou přijímáni ve šk. roce 2006/07.
- b) Od vzniku Centra počet studentů a postgraduálních pracovníků plynule roste a v posledním roce činnosti Centra pracuje na čtyřech pracovištích sdružených v Centru celkem 48 postgraduálních a pregraduálních studentů z různých universit v ČR, SR, Polsku, Itálii a Iránu. Dále v Centru pracuje 21 postgraduálních pracovníků z Polska, Španělska a ČR. Díky finančnímu zabezpečení Centra jsou všichni studenti pravidelně měsíčně odměňováni a to úměrně jejich pracovním a studijním výsledkům. Celková podpora dosahuje každoročně částky 1 milion Kč. Podíl studentů a postdoců je zásadní a je patrný z publikačního výstupu Centra (viz Příloha). Všichni mladí

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

pracovníci Centra spolupracují se staršími kolegy. V Centru probíhá několik vnitřních seminářů a jeden společný pro všechny pracovníky Centra a mladší kolegové a studenti na těchto seminářích prezentují své výsledky. Pracovníci a PhD studenti do 35 let se podílejí na pracovní kapacitě Centra více než 75 procenty.

- c) Mladí výzkumní pracovníci jsou pravidelně měsíčně odměňováni stejně jako starší pracovníci Centra. Kromě měsíční odměny jsou koncem roku udíleny mimořádné prémie úměrné publikačnímu výstupu. Mladší pracovníci se účastní mezinárodních konferencí a vědeckých pobytů. V letošním roce jsme se např. účastnili EURESCO konference v Exeteru (UK). Řešitel Centra byl pozvaný řečník, dva mladší kolegové Centra (Martin Kabeláč a Daniel Svozil) jakož i dva studenti (Petr Jurečka a Jiří Černý) se konference účastnili s plakátovou prezentací. Celá akce byla velmi zdařilá avšak finančně náročná a takovou akci si nelze představit bez finančního zabezpečení Centra. Podobně další pracovník Centra (Pavel Jungwirth) se spolu se svými 3 studenty (M. Mucha, B. Minofar, L. Vrbka) zúčastnil jako zvaný řečník konference „Workshop on short-range interactions in soft condensed matter“ v Regensburgu, SRN.

6. Způsoby zpřístupnění výsledků a výstupů centra

Krátce po založení centra byly zpřístupněny jeho webovské stránky na adrese www.molecular.cz. Na stránkách, jejichž návštěvnost dosahuje zhruba 400 unikátních adres měsíčně, byly široké veřejnosti zpřístupněny informace týkající se personálního složení, vědeckého programu, programu seminářů, přednášek a konferencí, jakož i vědeckých výsledků dosažených v průběhu existence centra. Stránky, které považujeme za jeden z významných kroků popularizace práce centra mezi veřejností, také v neposlední řadě obsahují průběžně aktualizovaný seznam publikací včetně abstraktů.

7. Závěrečné zhodnocení

- a) Můžeme konstatovat, že program Výzkumných center zcela splnil svůj účel. Poprvé v historii financování vědy v ČR byly dislokovány nemalé finanční prostředky nikoliv rovnoměrně přes celou vědeckou obec, ale selektivně podle dosažených vědeckých výsledků a vědeckých plánů na příští období. Srovnáme-li počátek existence centra a současný stav musíme konstatovat, že došlo k pronikavým změnám. V současné chvíli představuje centrum integrované pracoviště s více než 60 pracovníky ve kterém se provozuje výzkum na poli výpočetní a teoretické chemie s přímým napojením na experiment, na úrovni která je srovnatelná se špičkovými pracovišti v západní Evropě a USA. Podoba s analogickými pracovišti zejména v USA spočívá i v tom, že naše centrum je nejenom vědeckým, ale také školícím pracovištěm jak pro postgraduální studenty, tak pro pregraduální studenty a postdoky. Je velmi důležité, že školíme studenty nejen z celé ČR ale také z jiných evropských a mimoevropských zemí, a že naše centrum se stalo cílem i pro vědecké pobyty profesorů a vědeckých pracovníků z předních evropských a amerických universit a vědeckých institucí.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace:: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

- b) Centrum umožnilo integrovat vědecké kapacity a plně se koncentrovat na vědeckou práci. Díky tomu jsou naše vědecké výsledky v oblasti struktury a dynamiky komplexních molekulových systémů a biomolekul výjimečné kvality. Srovnání vědeckých výsledků v rámci ČR jednoznačně ukazuje na výjimečné postavení centra. Výzkum biomolekul v plynné fázi a jejich hydratace, struktury a reaktivity kovů v molekulových sítích, heterogenní chemie vodných aerosolů, fluorescenční a časově rozlišené spektroskopii, spinových vlastností biomakromolekul, jakož i studie v dalších oblastech jsou na světové špičce. Svědčí o tom mimo jiné publikace pracovníků centra v nejprestižnějších vědeckých časopisech (přes 160 publikovaných článků v impaktovaných mezinárodních časopisech a řada kapitol v monografiích) a zvané přednášky na nejvýznamnějších mezinárodních konferencích (včetně Gordon Research Conferences). Citační ohlas pracovníků centra je také mimořádný: řešitel centra je nejvíce citovaným vědcem ČR a mezi 10 nejvíce citovanými chemiky z ČR jsou 4 pracovníci centra. Za čtyři a půl roku trvání Centra obhájilo doktorskou práci celkem 12 studentů a nejméně dalších 10 studentů obhájí doktorskou práci v tomto akademickém roce. Jsme si vědomi, že centrum pro nás vytvořilo mimořádné podmínky. Naše výpočetní středisko patří k největším v celé ČR. Odměny studentům a vědeckým pracovníkům byly v akademickém měřítku nadprůměrné. Prostředky k návštěvám konferencí a zahraničních pracovišť byly opět nadprůměrné.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Příloha I - Úplný seznam publikací a příspěvků na konferencích za rok 2004

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2004

Monografie

1. Hof Martin, Hutterer R., Fidler V.: *Fluorescence Spectroscopy in Biology*. pp. 290, Springer Verlag, Heidelberg, 2004 (ISBN 3-540-22338-x)
2. Malijevská, A. Malijevský, J. P. Novák: *Záhady, klíče zajímavosti očima fyzikální chemie*, VŠCHT, 2004.

Část monografie

1. Hof Martin, Fidler V., Hutterer R.: *Basics of Fluorescence Spectroscopy in Bio-sciences*. In: *Fluorescence Spectroscopy in Biology*. (Hof, M. - Hutterer, R. - Fidler, V., Ed.), Springer, Heidelberg, 2004; 1-26
2. Sýkora Jan, Hutterer R., Hof Martin: *Solvent Relaxation as a Tool for Probing Micropolarity and -fluidity*. In: *Fluorescence Spectroscopy in Biology*. (Hof, M. - Hutterer, R. - Fidler, V., Ed.), Springer, Heidelberg, 2004; 62-68.
3. *Hof Martin: *Basics of Optical Spectroscopy*. In: *Handbook of Spectroscopy, Volume 1*. (Gauglitz, G. – Vo-Dinh, T., Ed.), pp. 39-47, Wiley-CVH, Weinheim 2003.
4. *Sablinskas, V., Steiner, G., Hof Martin: *Applications of Optical Spectroscopy*. In: *Handbook of Spectroscopy, Volume 1*. (Gauglitz, G. – Vo-Dinh, T., Ed.), pp. 89-168, Wiley-CVH, Weinheim 2003.
5. Z. Havlas, M. Kývala, J. Michl: *Spin-Orbit Coupling*. In: *Computational Methods in Photochemistry* (A. Kutateladze, Ed.), Taylor & Francis Books, 111-166 (in print).

*Nebylo uvedeno ve zprávě za rok 2003

Články v odborném periodiku

1. Sychrovsky, V.; Sponer, J.; Hobza, P.: *Theoretical Calculation of the NMR Spin-spin Coupling Constants and the NMR Shifts Allow Distinguishability between the Specific Direct and the Water-Mediated Binding of the Divalent Metal Cation to Guanine*, *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 663 (2004).
2. Hanus, M.; Kabeláč, M.; Rejnek, J.; Ryjáček, F.; Hobza, P.: *Correlated Ab Initio Study of Nucleic Acid Basis nad their Tautomers in the Gas Phase, in a Microhydrated Enviroment and in Aqueous Solution. Adenine*, *J. Phys. Chem. B* 108, 2087 (2004).
3. Chocholousova, J.; Spirko, V.; Hobza, P.: *First local minimum of the formic acid exhibits simultaneously red-shifted O-H...O and improper blue-shifted C-H...O hydrogen bonds*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 37 (2004).
4. Zierkiewicz, W., Michalska, D., Hobza, P.: *The barrier to internal rotation and electronic effects in para-halogenphenols: theoretical study*, *Chem Phys. Lett.* 386, 95 (2004).
5. Hocek, M., Stepnicka, P., Ludvik, J., Cisarova, I., Votruba, I., Reha, D., Hobza, P.: *Ferrocene-modified purines as potential electrochemical markers*, *Chem. Eur. J.* 10, 2058 (2004).
6. Jurecka, P., Sponer, J., Hobza, P.: *Potential energy surface of the cytosine dimmer*, *J. Phys.Chem. B* 108, 5466 (2004).
7. Pohle, W., Gauger, D.R., Bohl, M., Mrazkova, E., Hobza, P.: *Lipid hydration*, *Biopolymers*, 74, 27 (2004).
8. Sponer, J.E., Sychrovsky, V.; Sponer, J.; Hobza, P.: *Interactions of hydrated divalent metal cations with nucleic acid bases*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 2772 (2004).
9. Kabelac, M., Plutzer, Ch., Kleinermanns, K., Hobza, P.: *Isomer selective IR experiments and correlated ab initio quantum chemical calculations support planar H-bonded structure of the 7-methyl adenine...adenine and stacked structure of the 9-methyl adebnine...adenine base pairs*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 2781 (2004).
10. Bakker, J.M., Compagnon, I., Meijer, G., van Helden, G., Kabelac, M., Hobza, P., de Vries, M.S.: *The mid-IR absorption spectrum of gas-phase clusters of the nucleobases guanine and cytosine*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 2810 (2004).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

11. Pittner, J., Hobza, P.: CCSDT and CCSD(T) calculations on model H-bonded and stacked complexes, *Chem. Phys. Lett.* 386, 95 (2004).
12. Madeja, F., Havenith, M., Nauta, K., Miller, R.E., Chocholousova, J., Hobza, P.: A polar isomer of formic acid dimer in helium nano-droplets, *J. Chem. Phys.* 120, 10554 (2004).
13. Bulánek R., Čičmanec P., Knotek P., Nachtigallová D., Nachtigall P.: Localization of Cu⁺ sites and framework Al positions in high-silica zeolites: Combined experimental and theoretical study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6, 2003 (2004).
14. Wu R., Vaupel S., Nachtigall P., Brutschy B., "Structure and hydrogen bonding of different isomers of 2-aminopyridine center dot NH₃ studied by IR/R2PI spectroscopy", *J. Phys. Chem. A*, 108, 3338 (2004).
15. Wu R., Brutschy B., Nachtigall P., "Structure and hydrogen bonding of 2-aminopyridine·(H₂O)_n (n=1,2) studied by infrared ion depletion spectroscopy", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 515 (2004).
16. Honzíček Jan, Nachtigall P., Císařová I., Vinklárěk J.: "Synthesis and Characterization of Vanadocene(IV) Carboxylates: Combined Experimental and Computational Study", *J. Organomet. Chem.*, 689, 1180 (2004).
17. Slavicek P., Jungwirth P., Lewerenz M., Nahler N.H., Farnik M., Buck U.: Photodissociation of hydrogen iodide on the surface of large argon clusters: The orientation of the librational wave function and the scattering from the cluster cage. *J. Chem. Phys.* 120 (9): 4498 (2004).
18. Yang X., Fu Y.J., Wang X.B., Slavicek P., Mucha M., Jungwirth P., Wang L.S.: Solvent-mediated folding of a doubly charged anion. *J. Am. Chem. Soc.*, 126 (3), 876 (2004).
19. Kadlec F., Kadlec C., Kuzel P., Slavicek P., Jungwirth P.: Optical pump-terahertz probe spectroscopy of dyes in solutions: Probing the dynamics of liquid solvent or solid precipitate? *J. Chem. Phys* 120 (2), 912 (2004).
20. Horká V., Civiš S., Špirko V., Kawaguchi K., The infrared spectrum of CN in its ground electronic state, *Collect. Czechoslov. Chem. Commun.* 69,73(2004).
21. Šebera J., Špirko V., Fišer J., Kraemer W.P., Kawaguchi K., New rotation- vibration band and potential energy function of NeH⁺ in the ground electronic state, *J.Mol.Struct.* 695-696,5(2004).
22. Bludský O., Špirko V., T.E.Odaka, Jensen P., Hirano T., A theoretical study of the MgNC/MgCN isomerization in the electronic ground state, *J.Mol.Struct.* 695-696,219(2004).
23. Havlas Z., Kývala M. Michl J.: Spin-orbit coupling in biradicals. 4. Zero-field splitting in triplet nitrenes phosphinidenes and arsinidenes, *Collect. Czech. Chem. Commun.* 68 (2003) 2335-2343. (Tato práce nebyla uvedena ve Zprávě za rok 2003.)
24. Al. Malijevský, S. Labík, and A. Malijevský: Computer simulation of chemical potentials of ternary hard-sphere fluid mixtures, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6, 1742 (2004).
25. J. Genzer and J. Kolafa: Molecular dynamics of potential models with polarizability: comparison of methods, *J. Mol. Liq.* 109, 63 (2004).
26. J. Bumba and J. Kolafa: Global phase diagrams of the van der Waals-Dieterici and the BMCSL-Dieterici equations of state, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6, 2301 (2004).
27. J. Kolafa, S. Labík, and A. Malijevský: Accurate equation of state of the hard sphere fluid in stable and metastable regions, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6, 2335 (2004).
28. Al. Malijevský, O. Pizio and A. Patrykiewicz: Phase behavior of symmetric binary mixtures with partially miscible components in spherical pores. Density functional approach. *J. Mol. Liq.* 112, 81 (2004).
29. J. Kolafa: Time-reversible always stable predictor-corrector method for molecular dynamics of polarizable molecules, *J.Comput. Chem.* 25, 335-342 (2004).
30. Němec H., Kužel P., Garet F., Duvillaret L.: Time-domain terahertz study of defect formation in one-dimensional photonic crystals *Applied Optics* 43, 1965-1970 (2004).
31. Spöner, J., Jurecka, P., Hobza, P.: Accurate interaction energies of hydrogen-bonded nucleic acid base pairs, *J.Am. Chem. Soc.*, 126 (32), 10142 (2004)
32. Kučera J., Nachtigall P., Kotrla J., Košová G., Čejka J.: Pyrrole as a probe molecule for characterization of basic sites in ZSM-5: Combined FTIR spectroscopy and computational study. *J. Phys. Chem. B.*, 108 (41), 16012 (2004)
33. Honzíček Jan, Vinklárěk Jaromír, Nachtigall Petr: A density functional study of EPR hyperfine coupling for vanadocene (IV) complexes, *Chem. Phys.*, 305 (1-3), 291, (2004)
34. Winter B, Weber R., Schmidt P.M., Hertel I.V., Faubel M., Vrbka L., Jungwirth P.: Molecular Structure of Surface Active Salt Solutions: Photoelectron Spectroscopy and Molecular Dynamics Simulations of Aqueous Tetrabutyl-ammonium Iodide, *J. Phys. Chem. B.*, 108 (38), 14558, (2004)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

35. Vrbka L., Jungwirth P.: Counter-Ion Effects and Interfacial Properties of Aqueous Tetrabutyl Ammonium Halide Solutions, *Austr. J. Chem.*, 57, 1, (2004)
36. Yang X., Kiran B., Wang X.-B., Wang L.-S. Mucha M., Jungwirth P.: Solvation of the Azide Anion (N₃⁻) in Water Clusters and Aqueous Interfaces: A Combined Investigation by Photoelectron Spectroscopy, Density Functional Calculations, and Molecular Dynamics Simulations., *J.Phys. Chem. A.*, 108 (39), 7820, (2004)
37. Minofar B., Mucha M., Jungwirth P., Yang X., Fu Y.-J., Wang X.-B., Wang L.-S.: Bulk vs. Interfacial Aqueous Solvation of Dicarboxylate Dianions. *J. Am. Chem. Soc.*, 126 (37), 11691, (2004)
38. Vrbka L., Mucha M., Babak Minofar B., Jungwirth P., Brown E.C., Tobias D.J.: Propensity of Soft Ions for the Air/Water Interface. *Curr. Opin. Colloid. In.*, 9 (1-2), 67,(2004)
39. J. Vieceli, M. Roeselová, D. J. Tobias: Accommodation coefficients for water vapor at the air/water interface. *Chem. Phys. Lett.* 393 (2004) 249-255
40. Bohdan Schneider, Zdeněk Morávek, Helen M. Berman: RNA Conformational Classes. *Nucl. Acids Res.* 32, 1666-1677 (2004).
41. Nachtigall Petr, Davidová Markéta, Nachtigallová Dana, Sauer Joachim: The effect of zeolite framework on the NO interaction with Cu⁺ ions in zeolites. *J. Phys. Chem. B.*, 108(36), 13674, (2004)
42. Ronen, S.; Nachtigallová, D.; Schmidt, B.; Jungwirth, P.: Non-adiabatic chemical reaction triggered by electron photodetachment: An ab initio quantum dynamical study. *Physical Review Letters*, 93 (2004) 048301
43. Lepšík M., Kříž Z., Havlas Z., Efficiency of a second-generation HIV-1 protease inhibitor studied by molecular dynamics and absolute binding free energy calculations, *Proteins, Struct.Funct.Bioinfo.*, 57 (2), 279, (2004)
44. D. Nachtigallová, P. Nachtigall, O. Bludský: Calculations of the site specific stretching frequencies of CO adsorbed on Li⁺/ZSM-5. *Phys.Chem.Chem.Phys.* 6(24), 2004.
45. Zierkiewicz Wiktor, Hobza Pavel: The dihydrogen bond in X3C-H...H-M complexes (X = F, Cl, Br; M = Li, Na, K). A correlated quantum chemical ab initio and density functional theory study, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 5228, (2004)
46. Lankaš, F., Šponer, J. Langowski, J., Cheatham, T.E. J.: DNA deformability at the base pair level, *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 4124 (2004).
47. Veprek P, Jezek J, Trnka T, Vondrasek J., Molecular dynamics study of the effect of the gamma-abu insert on the conformational behavior of the glycopeptide dendrimers based on the oligolysine scaffold in N,N'-dimethylformamide, *J. Biomol.Struct.Dyn.* 22 (1): 79-90 AUG 2004
48. Švec M., Bauerova H., Pichova I., Konvalinka J., Strisovsky K., Proteinases of betaretroviruses bind single-stranded nucleic acids through a novel interaction module, G-patch, *FEBS Lett.* 576, 271-276, (2004)
49. Beneš Martin, Billy D., Benda Aleš, Speijer H., Hof Martin, Hermens W. T.: Surface-Dependent Transitions during Self-Assembly of Phospholipid Membranes on Mica, Silica, and Glass. *Langmuir* 20(23), 10129-10137 (2004).
50. Kral T., M. Lnagner, M. Hof, N. Adjimatera, I.S. Blagbrough. Fluorescence Correlation Spectroscopy od Spermine-DNA Interactions- Nanostructure and Physical Supramoleculat Chemistry of DNA condensation. *Chem. Listy* 98, s22-s23 (2004)
51. Hof M.: Solvent Relaxation in Biomembranes. *Chem. Listy* 98, s79-s80 (2004).
52. Kadlec F., Kužel P., Coutaz J.: Optical rectification at metal surfaces, *Opt. Lett.* 29, 2674-2676 (2004).
53. Kadlec F., Kamba S., Kužel P., Kadlec C., Kroupa J., Petzelt J.: High-temperature phase transitions in SrBi₂Ta₂O₉ film: a study by THz spectroscopy, *J. Phys.: Condens. Matter* 16, 6763-6769 (2004)
54. Kadlec F., Němec H., Kužel P.: Optical two-photon absorption in GaAs measured by optical pump-terahertz probe spectroscopy, *Phys. Rev. B* 70, 125205-1-125205-6 (2004)
55. Kužel P., Pashkin A., Kempa M., Kadlec F., Kamba S., Petzelt J.: Time-domain terahertz spectroscopy of SrBi₂Ta₂O₉, *Ferroelectrics* 300, 125-129 (2004)
56. Němec H., Duvillaret L., Garef F., Kužel P., Xavier P., Richard J., Raully D.: Thermally tunable filter for terahertz range based on a one-dimensional photonic crystal with a defect, *J. Appl. Phys.* 96, 4072-4075 (2004)
57. Zharov I., Weng T.C., Orendt A.M., Barich D.H. Penner-Hahn J., Grant D.M., Havlas Z., Michl J.: Metal cation-methyl interactions in CB11Me12- salts of Me₃Ge⁺, Me₃Sn⁺, and Me₃Pb⁺. *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 12033-12046 (2004).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

58. Svozil D., Jungwirth P., Havlas Z.: Electron binding to nucleic acid bases. Experimental and theoretical studies. A review. *Collection Czech. Chem. Commun.* 69, 1395-1428 (2004).
59. Kleinfeld O., Rulisek L., Bogin O., Frenkel A. Havlas Z., Burstein Y., Sagi I.: Higher metal-ligand coordination in the catalytic site of cobalt-substituted *Thermoanaerobacter brockii* alcohol dehydrogenase lowers the barrier for enzyme catalysis. *Biochemistry* 43, 7151-7161 (2004).
60. *Jurkiewicz P., Okruszek A., Hof Martin, Langner M.: Associating Oligonucleotides with Positively Charged Liposomes. *Cell. Mol. Biol. Lett.* 8(1), 77-84 (2003).
61. *Matějčík P., Humpolíčková J., Procházka K., Tuzar Zdeněk, Špírková M., Hof Martin, Webber S. E.: Hybrid Block Copolymer Micelles with Partly Hydrophobically Modified Polyelectrolyte Shells in Polar and Aqueous Media: Experimental Study Using Fluorescence Correlation Spectroscopy, Time-Resolved Fluorescence, Light Scattering and Atomic Force Microscopy. *J. Phys. Chem. B* 107, 8232-8240 (2003).
62. *Benda Aleš, Beneš Martin, Mareček V., Lhotský A., Hermens W. Th., Hof Martin: How to Determine Diffusion Coefficients in Planar Phospholipid Systems by Confocal Fluorescence Correlation Spectroscopy. *Langmuir* 19, 4120-4126 (2003).
63. *Humpolíčková J., Procházka K., Hof Martin, Tuzar Z., Špírková M.: Fluorescence Correlation Spectroscopy Using Octadecylrhodamine B as a Specific Micelle-Binding Fluorescent Tag, Light Scattering and Tapping Mode Atomic Force Microscopy Studies of Amphiphilic Water-Soluble Block Copolymer Micelles. *Langmuir* 19, 4111-4119 (2003).
64. *Jelínek K., Uhlík F., Limpouchová Z., Matějčík P., Humpolíčková J., Procházka K., Tuzar Z., Špírková M., Hof Martin: Amphiphilic Block Copolymer Micelles with Hydrophobically Modified Shells. *Mol. Simul.* 29(10/11), 655-660 (2003).
65. *Humpolíčková J., Procházka K., Hof Martin: Octadecylrhodamine B as A Specific Micelle-Binding Fluorescent Tag for Fluorescence Correlation Spectroscopy Studies of Amphiphilic Water-Soluble Block Copolymer Micelles. Spectroscopic Behavior in Aqueous Media. *Collect. Czech. Chem. Commun.* 68(10), 2105-2119 (2003).
66. *Štěpánek M., Humpolíčková J., Procházka K., Hof Martin, Tuzar Z., Špírková M., Wolff T.: Light Scattering, Atomic Force Microscopy and Fluorescence Correlation Spectroscopy Studies of Polystyrene-block-poly(2-vinylpyridine)-block-poly(ethylene oxide) Micelles. *Collect. Czech. Chem. Commun.* 68(10), 2120-2138 (2003).
67. *Sheynis T., Sýkora Jan, Benda Aleš, Kolusheva S., Hof Martin, Jelinek R.: Peptide-lipid Interactions and Bilayer Permeation Studied in Bio-mimetic Vesicles by Fluorescence Spectroscopy. *Eur. J. Biochem.* 270, 4478-4487 (2003).
68. *Bock H., Havlas Z., Gharagozloo-Hubmann K., Holl S., Sievert M.: 1,2-diphenylbenzene dianion: Alkali-metal salts with drastically spread C-6 rings. *Angew. Chem.* 42, 4385-4389 (2003)

*Nebylo uvedeno ve zprávě za rok 2003.

Publikace v tisku:

1. S. W. Hunt, M. Roeselová, W. Wang, L. M. Wingen, E. M. Knipping, D. J. Tobias, D. Dabdub, B.J. Finlayson-Pitts: Formation of molecular bromine from the reaction of ozone with deliquesced NaBr aerosol: Evidence for interface chemistry. *J. Phys. Chem. A* (2004)
2. M. Roeselová, J. Vieceli, L. X. Dang, B. C. Garrett, D. J. Tobias: Hydroxyl radical at the air/water interface. *J. Am. Chem. Soc.* (2004)
3. O. Bludský, P. Nachtigall, P. Čičmanec, P. Knotek, R. Bulánek: Characterization of the Cu⁺ sites in MFI zeolites: combined computational and experimental study. *Catal. Today* (2005)
4. Dabkowska, I., Gonzales, H.V., Jurecka, P., Hobza, P.: Stabilization energies of the hydrogen bonded and stacked structures of nucleic acid base pairs in the crystal geometries of CG, AT and AC DNA steps, and in the NMR geometry of 5'-d(GCGAAGC)-3' hairpin: complete basis calculations at the MP2 and CCSD(T) levels. *J. Phys. Chem. B* (2004)
5. Abo-Riziq Ali, Grace Louis, Nir Eyal, Kabeláč Martin, Hobza Pavel, de Vries Mattanjah: Photochemical selectivity in GC base pair structures, *Proc. Natl. Accd. Sci.* (2004)
6. Hanus Michal, Kabeláč Martin, Nachtigallová Dana, Hobza Pavel: Mutagenic properties of 5-Halogenuracils: correlated quantum chemical *ab initio* study, *Biochemistry*, (2004)
7. Prassana M.D., Vondrasek J., Wlodawer A., Bhat T.N., Application of INChI to curate, index and query

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

- 3-D structures, Proteins, Struct.Funct.Bioinfo., (2004)
8. Kral T., Widerak K., Langner M., Hof Martin: Propidium Iodide and PicoGreen as Dyes for the DNA Fluorescence Correlation Spectroscopy Measurements. J. Fluor., (2005)
 9. Kral Teresa, Benda Aleš, Hof Martin, Langner M.: Some Aspects of DNA Condensation Observed by Fluorescence Correlation Spectroscopy. Ann. Rev. Fluoresc., (2005)
 10. Němec, H., Kadlec, F., Surendran, S., Kužel, P., and Jungwirth, P., "Ultrafast far-infrared dynamics probed by terahertz pulses: a frequency domain approach. I. Model systems" J. Chem. Phys. (2005).
 11. S. Labík, J. Kolafa, and A.Malijevský: Virial coefficients of hard spheres and hard disks up to the ninth, Phys. Rev. E.
 12. P. Morávek, J. Kolafa, T. Hujo, and S. Labík: Excess volumes of homonuclear diatomic mixtures, J. Mol. Liq.
 13. J. Kolafa: Gear formalism of the always stable predictor-corrector method for molecular dynamics of polarizable molecules, J. Chem. Phys.
 14. Havlas Z., Kývala M., Michl J.: Spin-orbit coupling in biradicals. 5. Zero-field splitting in triplet dimethylnitrenium, dimethylphosphonium, and dimethylarsenium cations. Mol. Phys. 102, (2004).

Přednášky na konferencích a univerzitách

(Přednášky v rámci seminářů Centra nejsou uvedeny.)

Vědečtí pracovníci

Pavel Hobza

- Plenární přednáška *Noncovalent interactions* na EURESCO konferenci „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK
- Plenární přednáška *Structure and dynamics of the DNA base pairs* na konferenci „Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC-2004)“, Gyeongju, Korea
- Plenární přednáška *Improper hydrogen bond* „Raman and IR Spectroscopy in Biology and Medicine“, Jena, Německo
- Plenární přednáška *Accurate stabilization energies of biomolecular clusters* na konferenci „The Nature of Hydrogen Bonding and Density Functional Theory“, Lyon, Francie
- Plenární přednáška *DNA base pairs* „Electronic Structure: Principles and Applications“, Valladolid, Španělsko
- Přednáška *Aminoacids pairs and DNA base pairs* na University of California, Santa Barbara, USA
- Přednáškové turné na univerzitách ve státě Sao Paulo, Brazílie (tři přednášky na téma *Structure and dynamics of the DNA base pairs*)
- Přednáška *Aminoacids pairs and DNA base pairs* na Freie Universitaet Berlin

Pavel Jungwirth

- Zvaná přednáška *Molecular simulations of atmospheric aerosols* na „International conference on physical chemistry“ Hobart, Austrálie, 1.-5. 2. 2004.
- Přednáška *Photodissociation of hydrogen halides in rare gas clusters*, University of Canterbury, Christchurch, Nový Zéland, 13. 2. 2004.
- Přednáška *Atmospheric aerosols*, University of Dunedin, Nový Zéland, 16. 2. 2004.
- Zvaná přednáška *Propensity of soft anions for the air/water interface: The role of polarization interactions* na „Workshop on short range interactions in soft condensed matter“, Regensburg, SRN, 26-28. 2. 2004.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

- Zvané přednáška *Molecular simulations of atmospheric aerosols* na konferenci „227th ACS National Meeting“, Anaheim, USA, 28. 3. – 1. 4. 2004.
- Zvaná přednáška *The role of ice particle surfaces in thundercloud electrification* na „Workshop on ice, icy surfaces, and icy particles“, Telluride, USA, 25. 7. – 1. 8. 2004.
- Zvaná přednáška *Ions at the air/water interface* na „Gordon research conference on water and aqueous solutions“, Plymouth, USA, 1. – 6. 8. 2004.
- Přednáškové turné s přednáškou *Ions at the air/water interface* na Ohio State University, University of Colorado at Boulder, University of Georgia at Athens a Pacific Northwest National Laboratory, duben 2004.
- Zvaná přednáška *Towards a unified picture of surfaces of aqueous acid, base, and salt solutions* na Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Potsdam, SRN, 27. 10. 2004.

Petr Nachtigall:

- Přednáška – “Theoretical investigation of the water interaction with Cu⁺ and Cu²⁺ ions in MFI“ na International zeolite conference, cape town, south africa, april 2004.
- Zvaná přednáška „Theoretical investigation of probe molecule interaction with alkali metal exchange zeolites“, Institute of Chemical Technology, Valencia, Spain, 6. 10. 2004.
- Zvaná přednáška „Vibrational dynamics of CO adsorbed on monovalent cations in zeolites“, Universidad des las Islas Belears, Palma de Mallorca, Spain, 30. 9. 2004.

Dana Nachtigallová:

- Zvaná přednáška „Theoretical investigation of CO interaction with Li⁺/MFI systém.“, Universidad des las Islas Belears, Palma de Mallorca, Spain, 30. 9. 2004.

Petra Žďánská:

- Zvaná přednáška Non-Hermitian quantum mechanics na „Israel chemical society meeting“, Sde Boker, Israel a na Technion, Haifa, 21. – 26. 11. 2004.

Martina Roeselová:

- Zvaná přednáška Trapping of hydroxyl radical and ozone at aqueous aerosol surfaces, „227th ACS National Meeting, Division of Computers in Chemistry“, Anaheim, California, March 28 – April 1, 2004
- Přednáška Oxidation of NaBr aerosol by ozone: Importance of a surface reaction, „59th Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy“, Columbus, Ohio, June 21-25, 2004
- Přednáška Reactions of ozone and hydroxyl radical with sea salt aerosol: Experiments, simulations, and implications, „CRC Workshop on Chemistry at Interfaces“, Newport Beach, California, June 29, 2004
- Přednáška Reactions of ozone and hydroxyl radical with sea salt aerosol: Experiments and simulations, „Postdoctoral & Graduate Student Summer Seminar Series“, University of California, Irvine, July 9, 2004

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

- Přednáška Reactions of ozone and hydroxyl radical with NaCl and NaBr aqueous aerosol particles, Ohio State University, Columbus, USA, June 23, 2004
- Seminář Procesy na rozhraní vzduch/voda: MD simulace s atmosférickými aplikacemi, ÚFCH JH AV ČR, 25.10.2004

Vladimír Špirko

- Zvaná přednáška „*Continuum States of Molecular Systems.*“ na Ibaraki University, Okayama University, Kyushu University, Japan, říjen 2004.
- Zvaná přednáška „*Radiative Association of Polyatomic Molecules.*“ na Advanced Industrial Science & Technology Institute, Tsukuba, Japan, listopad 2004.

Šponer Jiří

- Zvaná přednáška „*Molecular interactions of NA bases. How to relate the gas phase data with solution situation and structural biology.*“ na EURESCO konferenci „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK, duben 2004.

Bohdan Schneider

- Příspěvek na „Workshop on organizing RNA structure knowledge“ v rámci IXth RNA Society Meeting, Madison, WI, May-June
- Třetí setkání českých a slovenských strukturních biologů, Nové Hrady, 12. března: Bohdan Schneider, Z. Morávek, H.M. Berman: Conformations of RNA Fragments

Martin Hof

- Zvaná přednáška „Solvent Relaxation in Biomembranes“, „1. Nové Hrady Winter Symposium on Structure and Function of Proteins“, Nové Hrady, Czech Republic. January, 22nd-24th, 2004
- Plenární přednáška „Fluorescence single molecular spectroscopy: characterization of DNA condensation and lateral phospholipid diffusion“, „4. Prague Workshop on Photoinduced Molecular Processes“, Prague, Czech Republic. April, 19th-23th, 2004
- Zvaná přednáška „Two Fluorescence Methods in Biomembrane Research: Solvent relaxation and Fluorescence Correlation Spectroscopy“, MEMPHYS - Center for Biomembrane Physics, Odense, Denmark, 26.5.2004
- Zvaná přednáška „Two Fluorescence Methods in Biomembrane Research: Solvent relaxation and Fluorescence Correlation Spectroscopy“, University of Copenhagen, Department of Pharmaceutics, Copenhagen, Denmark, 27.5.2004
- Přednáška „Solvent Relaxation in Biomembranes“, „4th INTERNATIONAL CONFERENCE ON SUPRAMOLECULAR SCIENCE & TECHNOLOGY“, Prague, Czech Republic. September, 5th-9th, 2004
- Přednáška „Solvent Relaxation in Biomembranes“, „2nd Prague Seminar in Biophysics of Lipids“, (Prague, October 6-9, 2004).
- Plenární přednáška „The Solvent Relaxation Technique“, „Advanced Practical Course on Optical Spectroscopy in Biology“, KFZ Juelich, Germany, October, 11th-13th, 2004
- Zvaná přednáška „Solvent Relaxation in Biomembranes“, Katholic University Leuven, Belgium, December, 8th, 2004

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Teresa Kral

- Plenární přednáška „DNA condensation characterised by FCS“, „World Conference on Magic Bullets, Nuernberg, Germany, Spetember 9-11., 2004.

Anatol Malijevský

- Zvaná přednáška: Hard spheres - High virial coefficients, the bridge function, high elementary diagrams, thermodynamics and structure. University of Regensburg, Germany, November 9, 2004.

S. Labík

- Zvaná přednáška: Chemie 21. století, Studentská vědecká konference, 10. 11. 2004.

Petr Kužel

- Zvaná přednáška: Phase sensitive time-domain THz reflectometry: steady-state and pump-probe measurements, International conference LEES04, Kloster Banz, Germany July 2004
- Přednáška: Time-resolved terahertz spectroscopy of photoexcited media, Université Bordeaux I, France, 1.6.2004.

Filip Kadlec

- Přednáška: Optical two-photon absorption in GaAs measured by optical pump-terahertz probe spectroscopy, Joint 29th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 12th International Conference on Terahertz Electronics, Karlsruhe, Germany, 27.9-1.10. 2004.

Vondrášek Jiří

- Přednáška „Molekulární modelování“ v rámci kursu pro postgraduální studenty, Ústav molekulární genetiky, Praha, listopad 2004
- Zvaná přednáška „Unexpected stability of hydrophobic core of small protein rubredoxin“ Winter symposium , Nové Hradky, leden 2004

Havlas Zdeněk

- Zvaná přednáška „Hydrophobic calculations“ na universitě v Cáchách, SRN, leden 2004.
- Zvaná přednáška „Relativistic calculations“ na konferenci o nanotechnologiích, Salt Lake City, Utah, USA, říjen 2004.
- Zvaná přednáška o výzkumu v ÚOCHB, Boulder, Colorado, USA, říjen 2004.
- Zvaná přednáška „Theoretical analysis of weak interactions in large systems“, Konference COST D31, Praha, listopad 2004.
- Přednáška „Fine splitting in triplet hetero-phenyl nitrenes“, WATOC, Cape Town, Jihoafrická republika, leden 2005.

Doktorandi a studenti*Martin Mucha*

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

- Zvaná přednáška *Modeling of vibrational spectra of surfaces of aqueous salt solutions* na konferenci „227th ACS National Meeting“, Anaheim, USA.

Luboš Vrbka

- Zvaná přednáška *Modeling of surfactant ions at the air/water interface* na Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Potsdam, SRN.
- Zvaná přednáška *Modeling of surfactant ions at the air/water interface* na Max Born Institute, Berlin, SRN.

Aleš Benda

- Přednáška *FCS – monitoring lipid diffusion and further developments in our laboratory* na 2nd Prague Seminar on Biophysics of Lipids, Praha

Jan Sýkora

- Zvaná přednáška *Solvation dynamics in PEGylated liposomes* na 4th Prague Workshop on the Photoinduced Processes, Praha, 19.-24.4.2004.

Hynek Němec

- Přednáška: Thermally tunable filter for terahertz range based on defect mode in one-dimensional photonic crystal, Joint 29th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 12th International Conference on Terahertz Electronics, Karlsruhe, Germany, 27.9-1.10. 2004

Martin Kempa

- Přednáška: Ferroelectric soft mode and central mode in SrBi₂Ta₂O₉ films, XVI Polish-Czech Seminar on structural and ferroelectric phase transitions, Great Mazurian Lakes, 13.-15.5. 2004

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Postery na konferencích

Vědeční pracovníci

- Kabeláč M., Zendlová L., Řeha D., Hobza P.: Microsolvation of adenine-thymine base pair and its methylated analogue. Molecular dynamics, molecular mechanic and high level correlated *ab initio* study. EURESCO konference „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK, květen 2004.
- Jurečka P., Hobza P.: Accurate stabilization energies of DNA base pairs. EURESCO konference „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK, květen 2004.
- M. Roeselová, S. W. Hunt, W. Wang, L. M. Wingen, E. M. Knipping, D. J. Tobias, D. Dabdub, B.J. Finlayson-Pitts: *Oxidation of aqueous NaBr aerosol by ozone*. „21st Symposium on Kinetics and Photochemical Processes in the Atmosphere“, Fullerton, California, February 24, 2004
- Svozil D., Jungwirth P., Havlas Z.: Elektron binding to thymine *ab initio* study. EURESCO konference „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“, Exeter, UK, květen 2004.
- R. Bulánek, P. Čičmanec, P. Knotek, D. Nachtigallová, P. Nachtigall: International zeolite conference, Cape Town, South Africa, April 2004: Poster – „Localization of Cu⁺ sites and framework Al positions in high-silica zeolites: combined experimental and theoretical study“
- J.Vondrášek, L.Bendová, V.Klusák, P.Jurecka, P.Hobza., Interactions of phenylalanines in rubredoxin described by *ab-initio* methods, a comparison with empirical forcefields. FEBS 2004, Federation of European Biochemical Societies 29th Annual Meeting
- M.Masa. L.Maresova. J.Vondrasek, M.Mares., propeptide of procathepsin D and its mature enzyme have two main interaction domains. FEBS 2004, Federation of European Biochemical Societies 29th Annual Meeting
- Rulišek L., Solomon E. I., Ryde U.: A QM/MM Study of the O₂ Reductive Cleavage in the Catalytic Cycle of Multi-Copper Oxidases, EUROBIK 7, Ga-Pa, Germany, Sept. 2004
- Pashkin A., Kadlec F., Nemeč H., Kuzel P.: Phase-sensitive time-domain terahertz reflectometry. Konference "Joint 29th International Conference on Infrared and Millimeter Waves and 12th International Conference on Terahertz Electronics", Karlsruhe, SRN, zari 2004
- Pashkin A., Kadlec F., Nemeč H., Kuzel P.: Phase-sensitive time-domain terahertz reflectometry. Konference "20th General Conference of the Condensed Matter Division", Praha, cervenec 2004

Doktorandi a studenti

- Černý J., Nachtigallová D., Špirko V., Hobza P.: Excited states of Guanine and Methylated Guanine tautomers: Theoretical study. *EURESCO konference „Molecules of Biological Interest in the Gas Phase“*, Exeter, UK, květen 2004.
- Mrázková E., Hobza P., Gauger D., Pohle W.: On the blue-shift of C-H stretch frequency of Methylphosphocholine induced by hydration: Experiment and Theory, RISBM konference, Jena, 1 -2 March 2004
- J. Kučera and P. Nachtigall: International zeolite conference, Cape Town, South Africa, April 2004: Poster – „Pyrrol as a probe molecule for characterization of basic sites in zeolites: a combined theoretical and experimental study“
- O. Bludský, M. Šilhan, D. Nachtigallová, R. Bulánek, P. Nachtigall: International zeolite conference, Cape Town, South Africa, April 2004: Poster – „Calculations of site-specific co stretching frequencies for carbonyls in Cu⁺/zeolite systems“
- Benda A, Kapusta P, Hof M : TCSPC Upgrade of a Confocal FCS Microscope; The 7th International Carl Zeiss sponsored Workshop on FCS and Related Methods, Dresden 2004
- Humpolíčková J, Matějček P, Štěpánek M, Procházka K, Hof M: Does the Solvent Relaxation Probed by Patman Provide Information on Hydration of Poly(oxyethylene) in Block Copolymer Micelles?; 18th ECIS, Spain, 2004
- Němeč H., Garet F., Duvillaret L., Coutaz J., Kužel P: Filtres passe-bande agiles dans le domaine THz, Journées Nationales de Microélectronique et Optoélectronique, La Grande Motte, France, 8.6.-11.6. 2004

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Příloha II - Úplný seznam publikací za období 2000 – 2004

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2000

1. Blue-Shifting Hydrogen Bonds, P. Hobza, Z. Havlas, *Chem. Rev.*, 2000, 100, 4253.
2. Already Two Water Molecules Change Planar H-bonded Structure of the Adenine...Thymine Base Pair to the Stacked Ones: a Molecular Dynamics Simulation Study., M. Kabeláč, F. Ryjáček, P. Hobza, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2000, 2, 4906.
3. L. J. Ball, R. Kuhne, B. Hoffmann, A. Hafner, P. Schmieder, R. Volkmer-Engert, M. Hof, M. Wahl, J. Schneider-Mergener, U. Walter, H. Oschkinat, T. Jarchau, Dual epitope recognition by the VASP EVH1 domain modulates polyproline ligand specificity and binding affinity, *EMBO JOURNAL*, 2000, 19 (18): 4903.

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2001

1. RI-MP2 calculations with extended basis sets – promising tool for study of H-bonded and stacked DNA base pairs, P. Jurečka, P. Nachtigall, and P. Hobza, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 3, 4578 (2001).
2. Hydrogen bonding, stacking and cation binding of DNA bases, J. Šponer, J. Leszczynski, and P. Hobza, *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 573, 43 (2001).
3. At nonzero temperatures, stacked structures of methylated nucleic acid base pairs and microhydrated nucleic acid base pairs are favoured over planar hydrogen-bonded structures: a molecular dynamics simulations study, M. Kabeláč and P. Hobza, *Chem. Eur. J.* 7, 2067 (2001).
4. The H-index unambiguously discriminates between hydrogen bonding and improper blue-shifting hydrogen bonding, P. Hobza, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 3, 2555(2001).
5. Improper, blue-shifting hydrogen bond between fluorobenzene and fluoroform, B. Reimann, K. Buchhold, S. Vaupel, B. Brutschy, Z. Havlas, V. Špirko, and P. Hobza, *J. Phys. Chem. A* 105, 5560 (2001).
6. Hydrogen bonding and stacking interactions of nucleic acid base pairs: a density functional theory based treatment, M. Elstner, P. Hobza, T. Frauenheim, S. Suhai, and E. Kaxiras, *J. Chem. Phys.* 114, 5149 (2001).
7. Potential energy and free energy surfaces of all ten canonical and methylated nucleic acid base pairs: molecular dynamics and quantum chemical ab initio studies, M. Kabeláč and P. Hobza, *J. Phys. Chem. B* 105, 5804 (2001).
8. The nature of improper, blue-shifting hydrogen bonding verified experimentally, B.J.van der Veken, W. A. Herrebout, R. Szostak, D.N.Shepkin, Z.Havlas, and P. Hobza, *J.Am. Chem. Soc.* 123, 0000 (2001).
9. Protonation of platinated adenine nucleobases. Gas phase vs. condensed phase picture. J. E. Sponer, J. Leszczynski, F. Glahe, B. Lippert, J. Sponer *Inorg. Chem* 40, 3269 (2001).
10. The influence of square planar platinum complexes on DNA base pairing. An ab initio DFT study. J.V. Burda, J. Sponer, J. Leszczynski, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 3, 4404 (2001).
11. A Systematic ab Initio Study of the Hydration of Selected Palladium Square – Planar Complexes. A comparison with Platinum Analogues. M. Zeizinger, J. V. Burda, J. Šponer, V. Kapsa, J. Leszczynski, *J. Phys. Chem. A* 105, 8086 (2001).
12. How Nucleobases Rotate when Bonded to a Metal Ion: Detailed View From an ab initio Quantum Chemical Study of a Cytosine Complex of trans-a2PtII .J.E. Sponer, F. Glahe, J. Leszczynski, B. Lippert, J. Sponer *J. Phys. Chem.* 105 B, 0000 (2001)
13. Characterization of Ag⁺ Sites in ZSM-5: A Combined Quantum Mechanics/Interatomic Potential Function Study, M. Šilhan, D. Nachtigallová, and P. Nachtigall, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 3, 4791 (2001).
14. Non-adiabatic interactions between the ground and low-lying excited electronic states: Vibronic states of the Cl-HCl complex, P. Ždánková, D. Nachtigallová, P. Nachtigall, and P. Jungwirth, *J. Chem. Phys.*, 115, 5974 (2001).
15. Theoretical interpretation of UV-VIS spectra of Cu- and Ag-species in zeolites: structure vs. transition energies, P. Nachtigall, M. Davidová, M. Šilhan, and D. Nachtigallová, In: Zeolites and mesoporous materials at the dawn of the 21st century. A. Galarneau, F. Di Renzo, F. Faujula and J. Védrine, Editors, Elsevier, Amsterdam, 2001, pages 14-O-03 (1-8). *Studies in Surface Science and Catalysis* 135.
16. Ab initio simulation of Cu-species in zeolites: siting, coordination, UV-vis spectra and reactivity, J. Sauer, D. Nachtigallová, and P. Nachtigall, NATO ASI Series II, Vol. 13, "Catalysis by Unique Metal Ion Structures in

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Solid Matrices. From Science to Application”, p 221, G. Centi, B. Wichterlová, and A.T. Bell, Editors, KLUWER, 2001.

17. The Concerted Use of Slab and Cluster Models in an Ab Initio Study of Hydrogen Desorption from the Si(100) Surface, J. A. Steckel, T. Phung, K. D. Jordan, and P. Nachtigall, *J. Phys. Chem. B*, 105, 4031 (2001).

18. Tobias, D. J.; Jungwirth, P.; Parrinello, M.: Surface solvation of halogen anions in water clusters: An ab initio molecular dynamics study of the Cl-(H₂O)₆ complex. *J. Chem. Phys.*, 114 (2001) 7036.

19. Jungwirth, P.; Tobias, D. J.: Chloride anion on aqueous clusters, at the air-water interface, and in liquid water: Solvent effects on Cl⁻ polarizability. *J. Phys. Chem. 105A (2001) 0000*.

20. Jungwirth, P.; Tobias, D. J.: The molecular structure of salt solutions: A new view of the interface with implications for heterogeneous atmospheric chemistry. *Journal of Physical Chemistry B*, 105 (2001) 10468.

21. Slavicek, P.; Roeselova, M.; Jungwirth, P.; Schmidt, B.: Preference of cluster isomers as a result of quantum delocalization: Potential energy surfaces and intermolecular vibrational states of Ne...HBr, Ne...HI, and HI(Ar)_n (n=1-6). *Journal of Chemical Physics*, 114 (2001) 1539.

22. Jungwirth, P.; Krylov, A. I.: Small doped 3He clusters: A systematic quantum chemistry approach to fermionic nuclear wavefunctions and energies. *Journal of Chemical Physics*, 114 (2001)0000

23. Jungwirth P.: Chemical oscillations based on photoautocatalysis of ozone. *Chemical Physics Letters*, 342 (2001) 287.

24. Can ordinary single-reference coupled-cluster methods describe potential energy surfaces with nearly spectroscopic accuracy? The renormalized coupled-cluster study of the vibrational spectrum of HF. Piecuch P., Kucharski S.A., Špirko V., Kowalski K., *Journal of Chemical Physics* 115, 5796 (2001)

25. Bound and low-lying quasi-bound rotation-vibration energy levels of the ground and first excited electronic states of HeH₂⁺. Kraemer W.P., Špirko V., Bludský O., *Chemical Physics*, 274, (2001) 0000

26. Potential energy surface and ro-vibrational energies of Ne₃⁺ in the ground electronic state. Šindelka M., Špirko V., Urban J., Mach P., Leszczynski J., *Int. J. Quantum Chem.* 85 (2001) 000

27. Critical Evaluation of the Prediction of the Dissociation Energy and the Energy Spectrum of the Ground State of KRb by the Reduced Potential Curve Method. Bludský O., Jenč F., *Journal of Molecular Spectroscopy* 207, 1 (2001)

28. Coumarine 6, Resorufin, Hypericin, and Flavins: Suitable Chromophores for Fluorescence Correlation Spectroscopy of Biological Molecules. M. Beneš, J. Hudeček, P. Anzenbacher, and M. Hof, *Collect. Czech. Chem. Comm.* 66, 855 (2001)

29. n-Anthroxlyoxy fatty Acids: a Unique Set of Fluorescent Probes for the Investigation of Membrane Structure and Dynamics, R. Hutterer and M. Hof, in ‘Recent Research Developments in Lipids’, editor S. G. Pandalai, Transworld Research Network, Vol 5, 71-83, (2001).

30. Coordination of Cu⁺ and Cu²⁺ ions in ZSM-5 in the vicinity of two framework Al atoms, D. Nachtigallová, P. Nachtigall, and J. Sauer, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 3, 1552 (2001).

31. Computational Study of Interaction of Cu⁺ with Ferrierite: Structure, Coordination, and Photoluminescence Spectra, P. Nachtigall, M. Davidová, D. Nachtigallová, and J. Sauer, *J Phys. Chem. B*, 105, 3510 (2001).

32. State-specific Brillouin-Wigner multireference coupled cluster study of the singlet-triplet separation in the tetramethyleneethane diradical, J. Pittner, P. Nachtigall, P. Čársky, and I. Hubač, *J. Phys. Chem. A*, 105, 1354 (2001).

33. Interaction of hydrated Mg²⁺ cation with bases, base pairs, and nucleotides, J. Munoz, J. Šponer, P. Hobza, M. Orozco, and F.J.Luque, *J. Phys. Chem. B* 105, 6051 (2001).

34. Hoogsteen and stacked structures of the 9-methyladenine...1-methylthymine pair are populated equally at experimental conditions: ab initio and molecular dynamics study, F. Ryjáček, O. Engkvist, J. Vacek, M. Kratochvíl, and P. Hobza, *J. Phys. Chem. A* 105, 1197 (2001).

35. Vacek, J., Michl, J. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 98, 5481, (2001).

36. Multidimensional WKB approximation and the lifetime calculation, Zamastil J., Špirko V., Čížek J., Skála L., Bludský O., *Phys.Rev.* 64, 042101 (2001).

37. Inversion splittings of SiH₃⁻. An ab initio study. Špirko V., Kraemer W.P., *J.Mol.Struct.* 547, 139 (2001).

38. Molecular dynamics of DNA quadruplex molecules containing inosine, 6-thioguanine and 6-thiopurine. R. Štefl, N. Špačková, I. Berger, J. Koča, J. Šponer, *Biophys. J.* 80, 455 (2001).

39. Structural dynamics and cation interactions of DNA quadruplex molecules containing mixed GCGC quartets. N. Špačková, I. Berger, J. Šponer: *J. Am. Chem. Soc.* 123, 3295 (2001).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

40. The Nucleic Acid Database (NDB). H.M. Berman; Z. Feng; B. Schneider; J. Westbrook; C. Zardecki: *pages 657-662 in International Tables of Crystallography, Volume F: Crystallography of Biological Molecules* (M.G. Rossmann; E. Arnold, eds.), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2001).
41. The PDB Data Uniformity Project. T.N. Bhat; P.E. Bourne; Z. Feng; G. Gilliland; S. Jain; B. Schneider; K. Schneider; N. Thanki; H. Weissig; J. Westbrook; H.M. Berman: *Nucl. Acids Res.* **29**, 214 (2001).
42. Fluorescent Dyes for Probing Solvent Relaxation in Biomembranes. M. Hof, P. Kapusta, V. Fidler, M. Nepraš, J. Urbanec, & R. Hutterer, *Latvian Journal of Physics and Technical Sciences* **6**, 183, (2000; since appeared 2001, not listed in the 2000 report)
43. Dynamics in Diether Lipid Bilayers and Interdigitated Bilayer Structures Studied by Time-Resolved Emission Spectra, Decay Time and Anisotropy Profiles. R. Hutterer & M. Hof, *J. Fluor.* **11**(3), 227 (2001)
44. Structures and properties of hard sphere mixtures based on a self-consistent integral equation, L. L. Lee and A. Malijevský, *J. Chem. Phys.* **114**, 7109 (2001).
45. "Carrier dynamics in low-temperature grown GaAs studied by THz emission spectroscopy", Němec, H., Pashkin, A., Kužel, P., Khazan, M., Schnüll, S., and Wilke, I., *J. Appl. Phys.*, **90**, 1303 (2001).
46. Enhanced long-range Si...N interactions in organosilicon cations. A theoretical study. Z. Havlas, H. Bock, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, **66**, 473 (2001).
47. Interactions between allosteric modulators and 4-DAMP and other antagonists at muscarinic receptors: Potential significance of the distance between the N and carbonyl C atoms in the molecules of antagonists. M. Lysíková, Z. Havlas, S. Tuček, *Neurochem. Res.*, **26**, 383 (2001).
48. Prediction of an inverse heavy-atom effect in H-C-CH₂Br: Bromine substituent as a π acceptor. Z. Havlas, J. Michl. *J. Am. Chem. Soc.*, **124**, 0000 (2001).
49. Metodika kvantově-chemických výpočtů systémů obsahujících přechodné kovy, L. Rulišek, *Chem. Listy* **95**, 0000 (2001).
50. Computational and NMR study of multiple antigenic glycopeptides (MAGs) with Tn antigens. Sejbal J., Vondrasek J., Velek J., Veprek P., Trnka T., Jezek J. *Peptides 2000*, Martinez J. & Fehrentz J-A. Eds. EDK, Paris, France, 2001.
51. Magnesium and Biological Activity of Oxytocin Analogues Modified on Aromatic Ring of Amino Acid in Position 2. Slaninova J., Maletinska L., Vondrasek J., Prochazka Z. *J. Peptide Sci.* **7**, 4113 (2001). 7. Strukturni a dynamicka pocitacova analiza vazby inhibitoru k protease viru HIV-1. M. Lepsik, *Chem. Listy* **95**, 318 (2001).

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2002

Publikace v časopisech:

1. Bouř P., Sychrovský V., Maloň P., Hanzlíková J., Baumruk V., Pospíšek, Buděšinský 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., Židek 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 (Δ .ECCSD(T)- Δ .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., Slaviček 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).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

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 HeH₂⁺. *Chem. Phys.* **276**,
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 (X, F, 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)
22. Sýkora J., 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 J., 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 Malijevský: 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-CH₂Br: Bromine substituent as a pi acceptor. *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 5606-5607 (2002).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

33. Rulíšek L., Havlas Z.: Theoretical studies of metal ion selectivity. 2. DFT calculations of complexation energies of selected transition metal ions (Co²⁺, Ni²⁺, Cu²⁺, Zn²⁺, Cd²⁺, and Hg²⁺) 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).
36. Vondrášek J., Wlodawer A.: HIVdb: A Database of the Structures of Human Immunodeficiency Virus Protease. *Proteins* **49**, 429-431 (2002).

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.

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. Burcl 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., Lutychyn 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., Porokhonsky V., Pashkin A., Bovtun V., Petzelt J., Nino J. C., Trolrier-McKinstry S., Lanagan M., Randall C.: Anomalous broad dielectric relaxation in Bi_{1.5}ZnNb_{1.5}O₇, *Phys. Rev. B* **66**, 054106.1-8 (2002)

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2003

Část monografie

1. Jungwirth Pavel: Physical Properties and Atmospheric Reactivity of Aqueous Sea Salt Micro-Aerosols. In: Water in Confining Geometries. (Buch, V. - Devlin, J. P., Ed.), pp. 277-293, Springer, Berlin 2003.
2. Slaviček Petr, Jungwirth Pavel: Photodissociation of Hydrogen Halides in a Cryogenic Rare Gas Environment: A Complex Approach to Simulations of Cluster Experiments. In: NATO ASI Series. , Plenum Press, New York, v tisku.
3. Fundamentals of DNA and RNA structure. S. Neidle; B. Schneider; H. M. Berman: *pages 41-73 in: Structural Bioinformatics* (P. E. Bourne; H. Weissig, eds.), John Wiley & Sons, Hoboken (2003).
4. The Nucleic Acid Database. H. M. Berman; J. Westbrook; Z. Feng; L. Iype; B. Schneider; C. Zardecki: *pages 119- 216 in Structural Bioinformatics* (P. E. Bourne; H. Weissig, eds.), John Wiley & Sons, Hoboken (2003).
5. Havlas Z., Kyvala M., Michl J.: Spin-Orbit Coupling. (Kutateladze A., Ed.), Kluwer, v tisku.
5. Hof Martin: Basics of Optical Spectroscopy. In: Handbook of Spectroscopy, Volume 1. (Gauglitz, G. – Vo-Dinh, T., Ed.), pp. 39-47, Wiley-CVH, Weinheim 2003.
6. Sablinskas, V., Steiner, G., Hof Martin: Applications of Optical Spectroscopy. In: Handbook of Spectroscopy, Volume 1. (Gauglitz, G. – Vo-Dinh, T., Ed.), pp. 89-168, Wiley-CVH, Weinheim 2003.
- Z. Havlas, M. Kývala, J. Michl: Spin-Orbit Coupling. In: Computational Methods in Photochemistry (A. Kutateladze, Ed.), Taylor & Francis Books, 111-166 (in print).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Články v odborném periodiku

1. Kučera Jan, Nachtigall Petr: Coordination of Alkali Metal Ions in ZSM-5: A Combined Quantum Mechanics/Interatomic Potential Function Study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 5, 3311-3317 (2003).
2. Salvador P., Curtis J. E., Tobias D. J., Jungwirth Pavel: Polarizability of the Nitrate Anion and Its Solvation at the Air/Water Interface. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 5, 3752-3757 (2003).
3. Nahler N. H., Baumfalk R., Buck U., Vach H., Slaviček Petr, Jungwirth Pavel: Photodissociation of HBr in and on Arn Clusters: The Role of the Position of the Molecule. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 5, 3394-3401 (2003).
4. Šilhan Martin, Nachtigall Petr, Bludský Ota: Theoretical Investigation of the Vibrational Dynamics of Ag+CO Solvated in the Ne Matrix. *Chem. Phys. Lett.* 375(1/2), 54-58 (2003).
5. Kučera Jan, Nachtigall Petr: Theoretical Study of Pyrrole Interaction with Alkali Metal Exchanged Zeolites: Investigation of the Reliability of Cluster and Periodic Models. *Collect. Czech. Chem. Commun.* 68(10), 1848-1860 (2003).
6. Davidová Markéta, Nachtigallová Dana, Bulánek R., Nachtigall Petr: Characterization of the Cu+ Sites in High-Silica Zeolites Interacting with CO Molecule: Combined Computational and Experimental Study. *J. Phys. Chem. B* 107, 2327-2332 (2003).
7. Mrázková Eva, Hobza Pavel: 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* 107(7), 1032-1039 (2003).
8. Hobza Pavel, Špirko Vladimír: 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.* 5(6), 1290-1294 (2003).
9. Sychrovský Vladimír, Schneider Bohdan, Hobza Pavel, Židek 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.* 5, 734-739 (2003).
10. Slaviček Petr, Kalus R., Paška P., Odvárková I., Hobza Pavel, Malijevský A.: State-of-the-art Correlated ab initio Potential Energy Curves for Heavy Rare Gas Dimers: Ar₂, Kr₂ and Xe₂. *J. Chem. Phys.* 119(4), 2102-2119 (2003).
11. Jungwirth Pavel: Aerosoly a chemie atmosféry - Co se děje na povrchu částic v atmosféře?. (cze) . *Vesmír* 82(4), 196-198 (2003).
12. Špačková Naďa, Cheatham, III T. E., Ryjáček Filip, Lankaš Filip, Meervelt van L., Hobza Pavel, Šponer Jiří: Molecular Dynamics Simulations and Thermodynamics Analysis of DNA - Drug Complexes. I. Minor Groove Binding between 4',6-Diamidino-2-Phenylindole (DAPI) and DNA Duplexes in Solution. *J. Am. Chem. Soc.* 125, 1759-1769 (2003).
13. Ryjáček Filip, Kubař Tomáš, Hobza Pavel: New Parameterization of the Cornell et al Empirical Force Field Covering Amino Group Nonplanarity in Nucleic Acid Bases. *J. Comput. Chem.* 24, 1891-1901 (2003).
14. Mucha Martin, Jungwirth Pavel: Salt Crystallization from an Evaporating Aqueous Solution by Molecular Dynamics Simulations. *J. Phys. Chem. B* 107(33), 8271-8274 (2003).
15. Slaviček Petr, Jungwirth Pavel, Lewerenz M., Nahler N. H., Fárnik M., Buck U.: Pickup and Photodissociation of Hydrogen Halides in Floppy Neon Clusters. *J. Phys. Chem. A* 107, 7743-7754 (2003).
16. Špirko Vladimír, Šindelka Milan, Shirsat R. N., Leszczynski J.: Bound and Continuum Vibrational States of the Bifluoride Anion. *Chem. Phys. Lett.* 376, 595-605 (2003).
17. Šindelka Milan, Špirko Vladimír, Kraemer W. P.: Vibrational Linestrengths for the Ground and First Excited Electronic States of HeH₂⁺. *Theor. Chem. Acc.* 110(3), 170-175 (2003).
18. Mrugala F., Špirko Vladimír, Kraemer W. P.: Radiative Association of HeH₂⁺. *J. Chem. Phys.* 118(23), 10547- 10560 (2003).
19. Šponer Jiří, Lankaš Filip , Langowski Jorg, Cheatham TE, DNA basepair step deformability inferred from molecular dynamics simulations *BIOPHYSICAL JOURNAL* 85 (5): 2872-2883 (2003).
20. Bludský Ota, Šilhan Martin, Nachtigallová Dana, Nachtigall Petr: Calculations of Site-Specific CO Stretching Frequencies for Copper Carbonyls with the "Near Spectroscopic Accuracy": CO Interaction with Cu+/MFI. *J. Phys. Chem. A*, 107, 10381 (2003).
21. Roeselová Martina, Jungwirth Pavel, Tobias D. J., Gerber R. B.: Impact, Trapping, and Accommodation of Hydroxyl Radical and Ozone at Salt Aerosol Surfaces: A Molecular Dynamics Study. *J. Phys. Chem. B*, 107, 12690 (2003).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

22. Hanus Michal, Ryjáček Filip, Kabeláč Martin, Kubař T., Bogdan T. V., Trygubenko S. A., Hobza Pavel: Correlated *ab initio* Study of Nucleic Acid Bases and Their Tautomers in the Gas Phase, in a Microhydrated Environment and in Aqueous Solution. Part 2. Guanine. Surprising Stabilization of Rare Tautomers in Aqueous Solution. *J. Am. Chem. Soc.*, 125, 7678-7682 (2003).
23. Rulíšek Lubomír, Šponer Jiří: Outer-Shell and Inner-Shell Coordination of Phosphate Group to Hydrated metal Ions (Mg^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+}) in Presence and Absence of Nucleobase. The role of Non-electrostatic Effects. *J. Phys. Chem. B*, 107(8), 1913-1923 (2003)
24. Chocholoušová Jana, Vacek Jaroslav, Hobza Pavel: Acetic acid dimer in the gas phase, nonpolar solvent, microhydrated environment, and dilute and concentrated acetic acid: *ab initio* quantum chemical and molecular dynamics simulations. *J. Phys. Chem. A*, 107,3086–3090 (2003).
25. Šponer Jiří, Hobza Pavel: Molecular Interactions of Nucleic Acid Bases. A Review Quantum Chemical Studies. *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 68, 2231-2236 (2003).
26. Kučera Jan, Nachtigall Petr: Pyrol jako testovací molekula k charakterizaci ZSM-5 s ionty alkalických kovů: Kombinace teoretické a experimentální studie. *Chem. Listy*, 97, 1070 (2003).
27. Jurečka Petr, Hobza Pavel: True Stabilization Energies for the Optimal Planar Hydrogen Bonded and Stacked Structures of Guanine...Cytosine, Adenine...Thymine and their 9- and 1-Methyl Derivatives: Complete Basis Set Calculations at the MP2 and CCSD(T) Levels and Comparison with Experiment. *J. Am. Chem. Soc.*, 125,0000 (2003).
28. Jungwirth, P.; Curtis, J. E.; Tobias, D. J.: Polarizability and aqueous solvation of sulfate dianion. *Chemical Physics Letters*, 367 (2003) 704.
29. Alexandr Malijevský, Anatol Malijevský, Santos B. Yuste, Andrés Santos, and Mariano López de Haro: Structure of ternary additive hard-sphere fluid mixtures. *Phys. Rev. E* 66, 061203 (2002).
30. Stanislav Labík, Hana Gabrielová, Jiří Kolafa, and Anatol Malijevský: Calculation of elementary diagrams using a Metropolis-like simulation method. *Mol. Phys.* 101, 1139 (2003).
31. Petr Slaviček, René Kalus, Petr, Paška, Iva Odvárková, Pavel Hobza, and Anatol Malijevský: State-of-the-art correlated *ab initio* potential energy curves for heavy rare gas dimers: Ar_2 , Kr_2 , and Xe_2 . *J. Chem. Phys.* 119, 1 (2003).
32. Kempa M., Kužel P., Kamba S., Samoukhina P., Petzelt J., Garg A., Barber Z.: The ferroelectric soft mode and central mode in $SrBi_2Ta_2O_9$ films, *J. Phys.: Condens. Matter* 15, 8095-8102 (2003).
33. 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*, 3-61–3-64 (2003).
34. Pashkin A., Kempa M., Němec H., Kadlec F., Kužel P.: Phase-sensitive time-domain terahertz reflection spectroscopy, *Rev. Sci. Instrum.* 74, 4711-4717 (2003).
35. Bock H., Havlas Z., Gharagozloo-Hubmann K., Holl S., Sievert M.: 1,2-diphenylbenzene dianion: Alkali-metal salts with drastically spread C-6 rings. *Angew. Chem. Int. Ed.* 42, 4385-4389 (2003).
36. Meca L., Reha D., Havlas Z.: Racemization barriers of 1,1'-binaphthyl and 1,1'-binaphthalene-2,2'-diol: A DFT study. *J. Org. Chem.* 68, 5677-5680 (2003).
37. Rulíšek L., Havlas Z.: Using DFT Methods for the Prediction of the Structure and Energetics of Metal-Binding Sites in Metalloproteins. *Int. J. Quantum Chem.* 91, 504-510 (2003).
38. Rulíšek L., Havlas Z.: Theoretical Studies of Metal Ion Selectivity. 3. A Theoretical Design of the Most Specific Combinations of Functional Groups Representing Amino Acid Side Chains for the Selected Metal Ions (Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , and Hg^{2+}). *J. Phys. Chem. B* 107, 2376-2385 (2003).
39. Klusák V., Havlas Z., Rulíšek 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.* 10, 331-340 (2003).
40. Jurkiewicz P., Okruszek A., Hof Martin, Langner M.: Associating Oligonucleotides with Positively Charged Liposomes. *Cell. Mol. Biol. Lett.* 8(1), 77-84 (2003).
41. Matějčík P., Humpolíčková J., Procházka K., Tuzar Zdeněk, Špírková M., Hof Martin, Webber S. E.: Hybrid Block Copolymer Micelles with Partly Hydrophobically Modified Polyelectrolyte Shells in Polar and Aqueous Media: Experimental Study Using Fluorescence Correlation Spectroscopy, Time-Resolved Fluorescence, Light Scattering and Atomic Force Microscopy. *J. Phys. Chem. B* 107, 8232-8240 (2003).
42. Benda Aleš, Beneš Martin, Mareček V., Lhotský A., Hermens W. Th., Hof Martin: How to Determine Diffusion Coefficients in Planar Phospholipid Systems by Confocal Fluorescence Correlation Spectroscopy. *Langmuir* 19, 4120-4126 (2003).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

43. Humpolíčková J., Procházka K., Hof Martin, Tuzar Z., Špírková M.: Fluorescence Correlation Spectroscopy Using Octadecylrhodamine B as a Specific Micelle-Binding Fluorescent Tag, Light Scattering and Tapping Mode Atomic Force Microscopy Studies of Amphiphilic Water-Soluble Block Copolymer Micelles. *Langmuir* 19, 4111-4119 (2003).
44. Jelínek K., Uhlík F., Limpouchová Z., Matějčík P., Humpolíčková J., Procházka K., Tuzar Z., Špírková M., Hof Martin: Amphiphilic Block Copolymer Micelles with Hydrophobically Modified Shells. *Mol. Simul.* 29(10/11), 655-660 (2003).
45. Humpolíčková J., Procházka K., Hof Martin: Octadecylrhodamine B as A Specific Micelle-Binding Fluorescent Tag for Fluorescence Correlation Spectroscopy Studies of Amphiphilic Water-Soluble Block Copolymer Micelles. Spectroscopic Behavior in Aqueous Media. *Collect. Czech. Chem. Commun.* 68(10), 2105-2119 (2003).
46. Štěpánek M., Humpolíčková J., Procházka K., Hof Martin, Tuzar Z., Špírková M., Wolff T.: Light Scattering, Atomic Force Microscopy and Fluorescence Correlation Spectroscopy Studies of Polystyrene-block-poly(2-vinylpyridine)-block-poly(ethylene oxide) Micelles. *Collect. Czech. Chem. Commun.* 68(10), 2120-2138 (2003).
47. Sheynis T., Sýkora Jan, Benda Aleš, Kolusheva S., Hof Martin, Jelínek R.: Peptide-lipid Interactions and Bilayer Permeation Studied in Bio-mimetic Vesicles by Fluorescence Spectroscopy. *Eur. J. Biochem.* 270, 4478-4487 (2003).
48. Bock H., Havlas Z., Gharagozloo-Hubmann K., Holl S., Sievert M.: 1,2-diphenylbenzene dianion: Alkali-metal salts with drastically spread C-6 rings. *Angew. Chem.* 42, 4385-4389 (2003)

Seznam publikací financovaných z prostředků projektu za rok 2004

Monografie

1. Hof Martin, Hutterer R., Fidler V.: *Fluorescence Spectroscopy in Biology*. pp. 290, Springer Verlag, Heidelberg, 2004 (ISBN 3-540-22338-x)
2. Malíjevská, A. Malíjevský, J. P. Novák: *Záhady, klíče zajímavosti očima fyzikálních chemie*, VŠCHT, 2004.

Část monografie

1. Hof Martin, Fidler V., Hutterer R.: Basics of Fluorescence Spectroscopy in Bio-sciences. In: *Fluorescence Spectroscopy in Biology*. (Hof, M. - Hutterer, R. - Fidler, V., Ed.), Springer, Heidelberg, 2004; 1-26
2. Sýkora Jan, Hutterer R., Hof Martin: Solvent Relaxation as a Tool for Probing Micropolarity and -fluidity. In: *Fluorescence Spectroscopy in Biology*. (Hof, M. - Hutterer, R. - Fidler, V., Ed.), Springer, Heidelberg, 2004; 62-68.

Články v odborném periodiku

1. Sychrovský, V.; Šponer, J.; Hobza, P.: Theoretical Calculation of the NMR Spin-spin Coupling Constants and the NMR Shifts Allow Distinguishability between the Specific Direct and the Water-Mediated Binding of the Divalent Metal Cation to Guanine, *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 663 (2004).
2. Hanus, M.; Kabeláč, M.; Rejnek, J.; Ryjáček, F.; Hobza, P.: Correlated Ab Initio Study of Nucleic Acid Basis nad their Tautomers in the Gas Phase, in a Microhydrated Environment and in Aqueous Solution. *Adenine, J. Phys. Chem. B* 108, 2087 (2004).
3. Chocholousova, J.; Spirko, V.; Hobza, P.: First local minimum of the formic acid exhibits simultaneously red-shifted O-H...O and improper blue-shifted C-H...O hydrogen bonds, *J. Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 37 (2004).
4. Zierkiewicz, W., Michalska, D., Hobza, P.: The barrier to internal rotation and electronic effects in parahalogenphenols: theoretical study, *Chem Phys. Lett.* 386, 95 (2004).
5. Hocek, M., Štepaník, P., Ludvík, J., Cisarova, I., Votruba, I., Reha, D., Hobza, P.: Ferrocene-modified purines as potential electrochemical markers, *Chem. Eur. J.* 10, 2058 (2004).
6. Jurecka, P., Šponer, J., Hobza, P.: Potential energy surface of the cytosine dimmer, *J. Phys. Chem. B* 108, 5466 (2004).
7. Pohle, W., Gauger, D.R., Bohl, M., Mrazkova, E., Hobza, P.: Lipid hydration, *Biopolymers*, 74, 27 (2004).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

- Sponer, J.E., Sychrovsky, V.; Sponer, J.; Hobza, P.: Interactions of hydrated divalent metal cations with nucleic acid bases, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 2772 (2004).
6. Kabelac, M., Plutzer, Ch., Kleinermanns, K., Hobza, P.: Isomer selective IR experiments and correlated ab initio quantum chemical calculations support planar H-bonded structure of the 7-methyl adenine...adenine and stacked structure of the 9-methyl adbenine...adenine base pairs, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 2781 (2004).
- Bakker, J.M., Compagnon, I., Meijer, G., van Helden, G., Kabelac, M., Hobza, P., de Vries, M.S.: The mid-IR absorption spectrum of gas-phase clusters of the nucleobases guanine and cytosine, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 2810 (2004).
7. Pittner, J., Hobza, P.: CCSDT and CCSD(T) calculations on model H-bonded and stacked complexes, *Chem. Phys. Lett.* 386, 95 (2004).
8. Madeja, F., Havenith, M., Nauta, K., Miller, R.E., Chocholousova, J., Hobza, P.: A polar isomer of formic acid dimer in helium nano-droplets, *J. Chem. Phys.* 120, 10554 (2004).
9. Bulánek R., Čičmanec P., Knotek P., Nachtigallová D., Nachtigall P.: Localization of Cu⁺ sites and framework Al positions in high-silica zeolites: Combined experimental and theoretical study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6, 2003 (2004).
10. Wu R., Vaupel S., Nachtigall P., Brutschy B., "Structure and hydrogen bonding of different isomers of 2-aminopyridine center dot NH₃ studied by IR/R2PI spectroscopy", *J. Phys. Chem. A*, 108, 3338 (2004).
11. Wu R., Brutschy B., Nachtigall P., "Structure and hydrogen bonding of 2-aminopyridine·(H₂O)_n (n=1,2) studied by infrared ion depletion spectroscopy", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 515 (2004).
12. Honzíček Jan, Nachtigall P., Císařová I., Vinklárěk J.: "Synthesis and Characterization of Vanadocene(IV) Carboxylates: Combined Experimental and Computational Study", *J. Organomet. Chem.*, 689, 1180 (2004).
- Slavicek P., Jungwirth P., Lewerenz M., Nahler N.H., Farnik M., Buck U.: Photodissociation of hydrogen iodide on the surface of large argon clusters: The orientation of the librational wave function and the scattering from the cluster cage. *J. Chem. Phys.* 120 (9): 4498 (2004).
13. Yang X., Fu Y.J., Wang X.B., Slavicek P., Mucha M., Jungwirth P., Wang L.S.: Solvent-mediated folding of a doubly charged anion. *J. Am. Chem. Soc.*, 126 (3), 876 (2004).
14. Kadlec F., Kadlec C., Kuzel P., Slavicek P., Jungwirth P.: Optical pump-terahertz probe spectroscopy of dyes in solutions: Probing the dynamics of liquid solvent or solid precipitate? *J. Chem. Phys.* 120 (2), 912 (2004).
15. Horká V., Civiš S., Špirko V., Kawaguchi K., The infrared spectrum of CN in its ground electronic state, *Collect. Czechoslov. Chem. Commun.* 69, 73 (2004).
16. Šebera J., Špirko V., Fišer J., Kraemer W.P., Kawaguchi K., New rotation- vibration band and potential energy function of NeH⁺ in the ground electronic state, *J. Mol. Struct.* 695-696, 5 (2004).
17. Bludský O., Špirko V., T.E. Odaka, Jensen P., Hirano T., A theoretical study of the MgNC/MgCN isomerization in the electronic ground state, *J. Mol. Struct.* 695-696, 219 (2004).
18. Havlas Z., Kývala M. Michl J.: Spin-orbit coupling in biradicals. 4. Zero-field splitting in triplet nitrenes phosphinidenes and arsinidenes, *Collect. Czech. Chem. Commun.* 68 (2003) 2335-2343. (Tato práce nebyla uvedena ve Zprávě za rok 2003.)
19. Al. Malijevský, S. Labík, and A. Malijevský: Computer simulation of chemical potentials of ternary hard-sphere fluid mixtures, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6, 1742 (2004).
20. J. Genzer and J. Kolafa: Molecular dynamics of potential models with polarizability: comparison of methods, *J. Mol. Liq.* 109, 63 (2004).
21. J. Bumba and J. Kolafa: Global phase diagrams of the van der Waals-Dieterici and the BMCSL-Dieterici equations of state, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6, 2301 (2004).
22. J. Kolafa, S. Labík, and A. Malijevský: Accurate equation of state of the hard sphere fluid in stable and metastable regions, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6, 2335 (2004).
23. Al. Malijevský, O. Pizio and A. Patrykiewicz: Phase behavior of symmetric binary mixtures with partially miscible components in spherical pores. Density functional approach. *J. Mol. Liq.* 112, 81 (2004).
- J. Kolafa: Time-reversible always stable predictor-corrector method for molecular dynamics of polarizable molecules, *J. Comput. Chem.* 25, 335-342 (2004).
24. Němec H., Kužel P., Garet F., Duvillaret L.: Time-domain terahertz study of defect formation in one-dimensional photonic crystals *Applied Optics* 43, 1965-1970 (2004).
25. Sponer, J., Jurecka, P., Hobza, P.: Accurate interaction energies of hydrogen-bonded nucleic acid base pairs, *J. Am. Chem. Soc.*, 126 (32), 10142 (2004)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

26. Kučera J., Nachtigall P., Kotrla J., Košová G., Čejka J.: Pyrrole as a probe molecule for characterization of basic sites in ZSM-5: Combined FTIR spectroscopy and computational study. *J. Phys. Chem. B.*, 108 (41), 16012 (2004)
27. Honzíček Jan, Vinklárek Jaromír, Nachtigall Petr: A density functional study of EPR hyperfine coupling for vanadocene (IV) complexes, *Chem. Phys.*, 305 (1-3), 291, (2004)
28. Winter B, Weber R., Schmidt P.M., Hertel I.V., Faubel M., Vrbka L., Jungwirth P.: Molecular Structure of Surface Active Salt Solutions: Photoelectron Spectroscopy and Molecular Dynamics Simulations of Aqueous Tetrabutyl-ammonium Iodide, *J. Phys. Chem. B.*, 108 (38), 14558, (2004)
29. Vrbka L., Jungwirth P.: Counter-Ion Effects and Interfacial Properties of Aqueous Tetrabutyl Ammonium Halide Solutions, *Austr. J. Chem.*, 57, 1, (2004)
30. Yang X., Kiran B., Wang X.-B., Wang L.-S. Mucha M., Jungwirth P.: Solvation of the Azide Anion (N₃⁻) in Water Clusters and Aqueous Interfaces: A Combined Investigation by Photoelectron Spectroscopy, Density Functional Calculations, and Molecular Dynamics Simulations., *J. Phys. Chem. A.*, 108 (39), 7820, (2004)
31. Minofar B., Mucha M., Jungwirth P., Yang X., Fu Y.-J., Wang X.-B., Wang L.-S.: Bulk vs. Interfacial Aqueous Solvation of Dicarboxylate Dianions. *J. Am. Chem. Soc.*, 126 (37), 11691, (2004)
32. Vrbka L., Mucha M., Babak Minofar B., Jungwirth P., Brown E.C., Tobias D.J.: Propensity of Soft Ions for the Air/Water Interface. *Curr. Opin. Colloid. In.*, 9 (1-2), 67, (2004)
33. J. Vieceli, M. Roeselová, D. J. Tobias: Accommodation coefficients for water vapor at the air/water interface. *Chem. Phys. Lett.* 393 (2004) 249-255
34. Bohdan Schneider, Zdeněk Morávek, Helen M. Berman: RNA Conformational Classes. *Nucl. Acids Res.* 32, 1666-1677 (2004).
35. Nachtigall Petr, Davidová Markéta, Nachtigallová Dana, Sauer Joachim: The effect of zeolite framework on the NO interaction with Cu⁺ ions in zeolites. *J. Phys. Chem. B.*, 108(36), 13674, (2004)
36. Ronen, S.; Nachtigallová, D.; Schmidt, B.; Jungwirth, P.: Non-adiabatic chemical reaction triggered by electron photodetachment: An ab initio quantum dynamical study. *Physical Review Letters*, 93 (2004) 048301
37. Lepšík M., Kříž Z., Havlas Z., Efficiency of a second-generation HIV-1 protease inhibitor studied by molecular dynamics and absolute binding free energy calculations, *Proteins, Struct.Funct.Bioinfo.*, 57 (2), 279, (2004)
38. D. Nachtigallová, P. Nachtigall, O. Bludský: Calculations of the site specific stretching frequencies of CO adsorbed on Li⁺/ZSM-5. *Phys.Chem.Chem.Phys.* 6(24), 2004.
39. Zierkiewicz Wiktor, Hobza Pavel: The dihydrogen bond in X3C-H...H-M complexes (X = F, Cl, Br; M = Li, Na, K). A correlated quantum chemical ab initio and density functional theory study, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 5228, (2004)
40. Lankaš, F., Šponer, J. Langowski, J., Cheatham, T.E. J.: DNA deformability at the base pair level, *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 4124 (2004).
41. Veprek P, Jezek J, Trnka T, Vondrasek J., Molecular dynamics study of the effect of the gamma-abu insert on the conformational behavior of the glycopeptide dendrimers based on the oligolysine scaffold in N,N'-dimethylformamide, *J. Biomol.Struct.Dyn.* 22 (1): 79-90 AUG 2004
42. Švec M., Bauerova H., Pichova I., Konvalinka J., Strisovsky K., Proteinases of betaretroviruses bind single-stranded nucleic acids through a novel interaction module, G-patch, *FEBS Lett.* 576, 271-276, (2004)
43. Beneš Martin, Billy D., Benda Aleš, Speijer H., Hof Martin, Hermens W. T.: Surface-Dependent Transitions during Self-Assembly of Phospholipid Membranes on Mica, Silica, and Glass. *Langmuir* 20(23), 10129-10137 (2004).
44. Kral T., M. Lnagner, M. Hof, N. Adjimatera, I.S. Blagbrough. Fluorescence Correlation Spectroscopy od Spermine-DNA Interactions- Nanostructure and Physical Supramoleculat Chemistry of DNA condensation. *Chem. Listy* 98, s22-s23 (2004)
45. Hof M.: Solvent Relaxation in Biomembranes. *Chem. Listy* 98, s79-s80 (2004).
46. Kadlec F., Kužel P., Coutaz J.: Optical rectification at metal surfaces, *Opt. Lett.* 29, 2674-2676 (2004).
47. Kadlec F., Kamba S., Kužel P., Kadlec C., Kroupa J., Petzelt J.: High-temperature phase transitions in SrBi₂Ta₂O₉ film: a study by THz spectroscopy, *J. Phys.: Condens. Matter* 16, 6763-6769 (2004)
48. Kadlec F., Němec H., Kužel P.: Optical two-photon absorption in GaAs measured by optical pump-terahertz probe spectroscopy, *Phys. Rev. B* 70, 125205-1-125205-6 (2004)
49. Kužel P., Pashkin A., Kempa M., Kadlec F., Kamba S., Petzelt J.: Time-domain terahertz spectroscopy of SrBi₂Ta₂O₉, *Ferroelectrics* 300, 125-129 (2004)

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace:: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

50. Němec H., Duvillaret L., Garet F., Kužel P., Xavier P., Richard J., Raully D.: Thermally tunable filter for terahertz range based on a one-dimensional photonic crystal with a defect, *J. Appl. Phys.* 96, 4072-4075 (2004)
- Zharov I., Weng T.C., Orendt A.M., Barich D.H. Penner-Hahn J., Grant D.M., Havlas Z., Michl J.: Metal cation-methyl interactions in CB11Me12- salts of Me3Ge+, Me3Sn+, and Me3Pb+. *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 12033-12046 (2004).
51. Svozil D., Jungwirth P., Havlas Z.: Electron binding to nucleic acid bases. Experimental and theoretical studies. A review. *Collection Czech. Chem. Commun.* 69, 1395-1428 (2004).
52. Kleifeld O., Rulisek L., Bogin O., Frenkel A. Havlas Z., Burstein Y., Sagi I.: Higher metal-ligand coordination in the catalytic site of cobalt-substituted *Thermoanaerobacter brockii* alcohol dehydrogenase lowers the barrier for enzyme catalysis. *Biochemistry* 43, 7151-7161 (2004).

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Příloha III - Seznam publikací uvedených v RIV za období 2000 – 2003

Tento seznam byl vytvořen ve formátu xls (RIV 2000-2003.xls), obsahuje publikace uvedené v RIV (<http://www.vlada.cz/1250/rvv/riv/rivfind.sqw>) pro Identifikační kód projektu LN00A032 za období 2000 – 2003. List „Impact faktory časopisů“ uvádí informace o časopisech, ve kterých bylo publikováno a je součástí tištěné podoby Zprávy. Zdrojem informací je RIV a ISI Web of Knowledge.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Specifikace a zdůvodnění jednotlivých položek finančních prostředků projektu čerpaných v r. 2004

Jak bylo uvedeno v úvodu, v lednu letošního roku došlo k přestěhování nositele Centra z ÚFCH JH na ÚOCHB. Vzhledem k tomu, že dřívější spolunositel (ÚOCHB) se stal nositelem a naopak dřívější nositel (ÚFCH JH) spolunositelem, byla provedena změna v zakladatelské smlouvě o sdružení ke zřízení výzkumného centra LN00A032. Bylo také nutno provést novou kalkulaci celkových finančních výdajů projektu pro rok 2004. Následující údaje odpovídají již nové situaci a liší se od příslušné části v Průběžné zprávě za rok 2003.

Nositel:

Investice:	0
Neinvestiční:	9468
Z toho režie:	6056
Z toho mzdy:	3412

Spolunositel 1:

Investice:	0
Neinvestiční:	1728
Z toho režie:	960
Z toho mzdy:	768

Spolunositel 2:

Investice:	0
Neinvestiční:	1548
Z toho režie:	978
Z toho mzdy:	570

Spolunositel 3:

Investice:	0
Neinvestiční:	900
Z toho režie:	676
Z toho mzdy:	224

Veškeré prostředky Centra byly čerpány v souladu s návrhem pro rok 2004.

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Přehled čerpání finančních prostředků projektu v době řešení projektu

Náklady na řešení projektu

Rok	Účelová podpora ze státního rozpočtu (tis. Kč)	Jiné zdroje použité k řešení projektu (tis. Kč)	Typy jiných zdrojů (veřejné jiné než účelová podpora, tuzemské neveřejné, zahraniční atp.)
2000	17822	1815	veřejné
2001	23644	3630	veřejné
2002	13644	3630	veřejné
2003	19644	3630	veřejné
2004	13644	3630	veřejné
Celkem	88398	16335	veřejné

Zpracoval (jméno): Prof. Pavel Hobza

V Praze, dne 30. listopadu 2004

Název projektu : *Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul*
Řešitel: Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc
Příjemce dotace:: Ústav organické chemie a biochemie AVČR

Tisková zpráva²:

Centrum dosáhlo špičkových výsledků ve výpočetním a experimentálním studiu struktury a dynamiky komplexních molekulových systémů: především biomolekul v plynné fázi a jejich hydratace, reaktivity kovů v molekulových sítěch, heterogenní chemie vodných aerosolů a v dalších oblastech.

The Center has achieved top results in computational and experimental studies of the structure and dynamics of complex molecular systems and biomolecules: in particular biomolecules in the gas phase and their hydration, reactivity of metals in molecular sieves, heterogenous chemistry of aqueous aerosols and in other subjects.

V Praze,

dne: 30. 11. 2004

řešitel projektu
(podpis)

příjemce dotace
(razítko a podpis statut .zást. nositele)

² Tisková zpráva je součástí pouze závěrečné zprávy a charakterizuje hlavní dosažené výsledky projektu, (záznamy o konkrétních výstupech projektu jako jsou publikace, výzkumné zprávy, patenty atd. nositel zasílá každoročně do RIV!).