



LC512

CENTRUM BIOMOLEKUL A KOMPLEXNÍCH MOLEKULOVÝCH SYSTÉMŮ 

řešitel - koordinátor (LC) - Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.

řešitel - Ing. Roman Bulánek, PhD.

řešitel - RNDr. Petr Kužel, PhD.

řešitel - Prof. Ing. Anatol Malijevsky, CSc.

řešitel - RNDr. Phd. Michal Otyepka

za příjemce - koordinátor - Ústav organické chemie a biochemie AV ČR (IČ: 406)

ředitel ústavu

RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.

.....
(podpis, razítko)

za příjemce - Fyzikální ústav AV ČR (IČ: 402)

ředitel ústavu

Ing. Karel Jungwirth, DrSc.

.....
(podpis, razítko)

za příjemce - Univerzita Palackého v Olomouci (IČ: 403)

rektorka

Prof. MUDr. PhDr. Jana Mačáková, CSc.

.....
(podpis, razítko)

za příjemce - Univerzita Pardubice (IČ: 404)

rektor

Prof. Ing. Miroslav Ludwig, CSc.

.....
(podpis, razítko)

za spolupřijemce - **Vysoká škola chemicko-technologická v Praze** (IČ: 405)

rektor

Prof. Ing. Vlastimil Růžička, CSc.

.....
(podpis, razítko)

Verze zprávy: **1** Zpracováno dne: **23.1.2006**

2.0. POPIS PRŮBĚHU ŘEŠENÍ

Mezi nejvýznamnější vědecké výsledky Centra za rok 2005 patří:

Za spoluřešitele ÚOCHB AV ČR, Praha:

- i) Přesné výpočty stabilizačních energií aminokyselin v hydrofobním jádře proteinu rubredoxinu ukázaly, že sbalování proteinů není, jak se dosud uvádí, řízeno jen entropicky. Enthalpická stabilizace aminokyselin v jádře hraje významnou úlohu, kterou nelze zanedbat.
- ii) Určení struktury peptidů v plynné fázi představuje velmi komplikovaný úkol a lze jej vyřešit jen aplikací nejpřesnějších metod výpočetní chemie. Klíčovým problémem je významné uplatnění disperzní energie, která stabilizuje vybrané izomery peptidu. Disperzní energie není zahrnuta v metodách DFT, které se pro konformační účely hojně používají.
- iii) Byla srovnána afinita iontů (např. sodíku, cholinu, chloridu, a sulfátu) k povrchu hydratovaného proteinu a k rozhraní voda-vzduch. Výpočty ukázaly, že afinita těchto iontů k proteinům není analogická jejich chování na vodných površích.
- iv) Byly provedeny první molekulově dynamické simulace vysolování z mrznoucích vodných roztoků NaCl. Molekulové porozumění tomuto ději má význam pro děje v atmosféře (nabíjení bouřkových mraků, zamrzání polárních moří) i pro technologie (desalinace).
- v) Kombinace experimentálních technik s přesnými výpočty spektroskopických charakteristik molekul adsorbovaných na iontových centrech v zeolitech přispěla k pochopení vlatností adsorpčních a katalyticky aktivních center v molekulových sítích.
- vi) Pomocí hybridních QM/MM (quantum mechanics-molecular mechanics) metod byly studovány reakční mechanismy několika různých tříd enzymů: multi-copper oxidáz, superoxid dismutáz, serinové racemázy, a glutamát karboxypeptidázy II (posledně jmenovaný projekt je rozvíjen ve spolupráci s experimentálním pracovištěm v rámci tohoto centra). Byla předpovězena a následně pak na spolupracujícím experimentálním pracovišti potvrzena struktura katalyticky relevantních intermediátů, která slouží k lepšímu pochopení funkce a reaktivity těchto systémů.
- vii) Ve spolupráci teoretického a experimentálního pracoviště v rámci tohoto centra byl nalezen dosud nejúčinnější inhibitor serinové racemasy z myšího mozku, důležitého cíle farmaceutického zásahu. Stereoisomer téže sloučeniny je přitom dosud nejúčinnějším identifikovaným substrátem tohoto enzymu.
- viii) Bylo studováno štěpení degenerovaných hladin nejnižších tripletových stavů heterocyklických arylnitrenů a mechanismy fotochemických reakcí se zaměřením na inverzní vliv těžkého atomu. Získané poznatky umožňují lepší pochopení a porozumění fotochemickým procesům.
- ix) Byla studována elektronová struktura symetricky methylovaných carboranových anionů, molekul s perspektivou použití v nanotechnologiích.
- x) Byla vyvinuta nová metodika syntéz C-nukleosidů nesoucích substituované benzeny a pyridiny jako náhrady nukleobáze. Tyto látky budou dále studovány jako potenciální nová písmena pro rozšíření genetické abecedy.
- xi) Izomerizační reakce aromatických oligoacetylenových látek za katalýzy komplexy kobaltu vedly ke vzniku helikálních aromátů. Tyto molekuly se skládají z jedenácti cyklických jednotek a představují nový typ helicenů. Byla demonstrována možnost kontroly helicity s využitím diastereoselektivní syntézy. Fyzikálně chemické vlastnosti uvedených sloučenin, které souvisejí s molekulární vodivostí, budou dále studovány.

Za spoluřešitele VŠCHT, Praha:

Pracoviště spoluřešitele je tvořeno jednak teoretickým týmem (laboratoř statistické termodynamiky, LST), jednak týmem experimentálním (LMR).

LST:

- i) V souladu s návrhem projektu Centra jsme se zabývali základním výzkumem v oblasti molekulových interakcí, vnitřní struktury kapalin, plynů a jejich směsí a z ní vyplývajícího chování základních modelových systémů.

- ii) Za "highlight" svého úsilí v roce 2005 považujeme výpočet viriálních koeficientů až do devátého, což je dosavadním "světovým rekordem" ; výpočty byly založeny na automatické počítačové algebře a topologické analýze (publikace, konferenční výstupy).
- iii) Dalším výstupem, na který jsme hrdí, jsou nové teoretické výsledky u systému tzv. penetrabilních koulí (publikace, konferenční příspěvek).
- iv) Pokračujeme ve výzkumu tzv. můstkové funkce, základní veličiny v teorii integrálních rovnic (konferenční příspěvky, publikace v přípravě).
- v) V neposlední řadě si ceníme důkazu neanalytičnosti stavové rovnice (publikace, konferenční příspěvek).

LMR:

Základním přínosem LMR VŠCHT Praha pro řešení byl návrh, syntéza a studium nových strukturních motivů pro interakci s biopolymery, s důrazem na nalezení sekvenčně specifických receptorů pro interakci s dsDNA a vybranými proteiny, především isoformami NOS: eNOS, nNOS, iNOS. K tomuto zvolenému cíli směřovaly nové strukturní motivy založené na expandovaných porfyrinech, především pentapyrrolovém derivátu safzrinu, jehož ve vodě rozpustné deriváty (dosaženo vhodnou periferní substitucí) jsme identifikovali jako vhodné fluorescenční receptorové systémy pro biopolymery. Vedle toho jsme zjistili pozoruhodné vlastnosti těchto systémů, které lze charakterizovat jako chemické nukleázy. Zatímco většina syntetických modelů enzymů štěpících fosfodiesterovou vazbu obsahuje kation kovu, náš systém je jedním y mála příkladů, dosud v literatuře uvedených, kdy chemická nukleáza efektivně pracuje i bez přítomnosti kovového kationtu. Tento výsledek byl publikován v časopise JACS.

Vedle toho jsme připravili řadu porfyrinových konjugátů, především s alkaloidy, které budou testovány v tomto ohledu, jejich schopnost interakce s DNA a oligonukleotidy již byla prokázána. Analoga distamycinu specificky se vážícího na DNA byla směřována do oblasti bis a tetrakis derivátů, kde cílem bylo zjištění kooperativity při interakci s DNA a také zavedení fluorescenční jednotky do molekuly receptoru, který by umožnil snadno detekci vazebného procesu. Původně zvolený spacer, Trgerova báze, nevykázal žel očekávané zvýšení selektivity a afinity.

Druhou skupinou navržených a testovaných strukturních motivů reprezentují nové deriváty karboranů a metalokarboranů, které dosud v bioorganické a medicíně nebyly prakticky využívány. Naše aktivita směřovala do oblasti nalezení nových typů molekul schopných regulace produkce NO, tedy především možnost regulace krevního tlaku. Z mechanistického hlediska se jedná o nově identifikované látky se specifickou interakcí s isoformami enzymu NOS. Bylo dosaženo takové periferní modifikace, která poskytuje

efektivní inhibici a v některých případech i aktivaci v isoform specifickém modu. Výsledky jsou připravovány k publikaci, dosud jsme popsali agregační chování základních typů karboranů a metalokarboranů ve vodním prostředí- (viz publikace Langmuir)

Za spoluřešitele Univerzita Pardubice:

V rámci výzkumného centra se naše činnost, v souladu s návrhem projektu, v prvním roce řešení soustředila na charakterizaci kationtových center ve vysokosilikátových zeolitech typu MFI a FER s kationtově vyměněnými ionty Cu^+ , Li^+ , Na^+ a K^+ . Pomocí teplotně programovaných technik a IČ spektroskopie byla studována energetika interakce molekul CO s Cu^+ ionty a vibrace vazeb C-O v takto vzniklých povrchových karbonylech. IČ spektra mono- a di-karbonylů a TPD křivky byly měřeny a modelovány pro systémy MFI a FER zeolitů. Na základě TPD dat byly detekovány tři typy Cu^+ center, které se liší adsorpční energií. Ve spolupráci s teoretickým pracovištěm řešitele-koordinátora byly na základě velmi dobré shody experimentálně zjištěných a teoreticky napočítaných hodnot interakčních energií získány údaje o lokalizaci a koordinaci jednotlivých kationtových center Cu^+ iontů. IČ spektra získaná na stejných materiálech jasně prokázala, že lokalizace Cu^+ iontů ovlivňuje rovnovážnou konstantu přeměny monokarbonylu na dikarbonyl, ale neovlivňuje frekvenci fundamentální vibrace C-O na těchto iontech, jak bylo potvrzeno teoretickými studiemi na pracovišti řešitele-koordinátora. Porovnání experimentálních spekter karbonylů na iontech alkalických kovů s přesnými výpočty spektroskopických charakteristik molekul CO adsorbovaných na iontových centrech v zeolitech MFI a FER přispělo k pochopení vlastností adsorpčních center v molekulových sítích a k interpretaci jednotlivých vibračních pásů.

Za spoluřešitele Univerzita Palackého, Olomouc:

Pracoviště se v rámci Centra věnovalo výzkumu proteinů a to v oblastech sbalování proteinů, interakce protein-protein, interakce protein-inhibitor a v neposlední řadě enzymovou katalýzou. Výsledky teoretických výpočtů na modelovém systému p18INK4c ukázaly, dominantní úlohu disperzních sil při stabilizaci sbalené struktury proteinu. Na lidských cyklin-dependentních kinasach (CDK2 a CDK5) jsme studovali interakce s jejich regulačními podjednotkami (p25 a Cyklinem A), abychom vysvětlili specifitu vazby kinasa/regulační podjednotka a také vysvětlili odlišný mechanismus aktivace obou enzymů. Dosažené výsledky byly akceptovány pro publikaci v prestižním časopise JBC.

Významná skupina inhibitorů lidských cyklin-dependentních kinas se silným cytotoxickým účinkem je odvozena od N6-substituovaných derivátů adeninu. Inhibiční vlastnosti těchto sloučenin jsou dále zvyšovány jejich koordinací na vybrané ionty přechodných kovů. Struktura, elektronické vlastnosti a stabilita těchto inhibitorů a jejich komplexů byly studovány metodami na úrovni DFT v kombinaci s dostupnými modely implicitního solventu.

Během zahraniční stáže M. Otyepky na spolupracujícím pracovišti (SISSA/ISAS, Trieste, Italy) byla aplikována technika hybridní QM/MM kvantové dynamiky (Car-Parinello MD) na druhý reakční krok hydrolytické dehalogenace katalyzované enzymy z rodiny haloalkan dehalogenas. Na základě teoretických výpočtů byla odhadnuta velikost aktivační bariéry a byla diskutována v kontextu racionálního proteinového inženýrství enzymů haloalkan dehalogenas pro jejich praktické využití.

Za spoluřešitele FZÚ AV ČR, Praha:

i) Navrhli a ukázali jsme nový přístup k mikroskopii v blízkém poli využitelný v širokém frekvenčním pásmu od mikrovln po terahertzovou oblast a vhodný pro mikroskopii a spektroskopii biologických objektů.

Postavili jsme zcela nový experiment pro tuto metodu

ii) Studovali jsme fotoionizační mechanismy v plynném kyslíku excitovaném fokusovanými femtosekundovými pulsy. Ukázali jsme, že dominantním fotoionizačním mechanismem při excitaci u 400 nm je vícefotonová absorpce, zatímco při excitaci u 800 nm převládá generace plazmatu vlivem silného elektrického pole.

iii) Pomocí terahertzové spektroskopie jsme studovali emisi terahertzového záření vzniklého optickým usměrněním femtosekundových laserových pulsů na tenkých zlatých vrstvách. Experimenty umožnily určit složky tenzoru nelineární susceptibility a dokázaly nelokální charakter nelineární odezvy.

2.1.0. KOMENTÁŘ K TÝMU


Za spoluřešitele VŠCHT, Praha:

V roce 2006 bude tým rozšířen o RNDr. Petra Slavíčka, PhD.

Za spoluřešitele Univerzita Pardubice:

Na řešení projektů zahrnutých do výzkumného centra se mimo členů řešitelského týmu z řad zaměstnanců UPA podílel v rámci své disertační práce také student doktorského programu Univerzity Pardubice Ing. Karel Frolich. V roce 2006 bychom chtěli rozšířit řešitelský tým o Ing. Libora Čapka, Ph.D. a to kvůli plánovanému zakoupení a zprovoznění unikátního zařízení (nízkoteplotního izotermálního mikrokalorimetru). Zprovoznění takového zařízení je časově i odborně náročná záležitost, a proto bychom rádi posílili náš velmi malý tým o Ing. Čapka, který má dlouhodobé zkušenosti se zeolitovými materiály a jejich studiem a do budoucna počítáme s tím, že by měl mikrokalorimetrickou laboratoř na starosti.

2.1.1. PROJEKTOVÝ TÝM

IČ organizace	406
Obchodní jméno - název	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Zkratka názvu	ÚOCHB AV ČR 
Role organizace	příjemce - koordinátor
Vazba na organizaci	406
Druh organizace	Státní příspěvková organizace (zákon č. 219/2000 Sb.)

Adresa sídla, spojení na organizaci


- ulice, čp./č.or. Flemingovo náměstí / 2
- PSČ, obec 16610 Praha 6
- stát Česká republika
- telefon +420 220 183 111
- http:// www.uochb.cas.cz

Bankovní spojení

- DIČ CZ61388963
- banka kód, název 0710 - ČNB
- číslo účtu, sp.symbol 11338031,

Statutární zástupce

- titul před, jméno, příjmení, titul RNDr. Zdeněk Havlas DrSc.
za
- funkce ředitel ústavu
- telefon +420 220 183 333
- mobil
- fax +420 220 183 578
- email director@uochb.cas.cz 

IČ organizace 402
Obchodní jméno - název **Fyzikální ústav AV ČR**
Zkratka názvu FZÚ AVČR 
Role organizace příjemce
Vazba na organizaci 402
Druh organizace Státní příspěvková organizace (zákon č. 219/2000 Sb.)

Adresa sídla, spojení na organizaci


- ulice, čp./č.or. Na Slovance 2/
- PSČ, obec 18221 Praha 8
- stát Česká republika
- telefon 26605 2121
- http:// www.fzu.cz

Bankovní spojení

-DIČ CZ68378271
- banka kód, název 0300 - ČSOB Praha 1
- číslo účtu, sp.symbol 671996443,

Statutární zástupce

- titul před, jméno, příjmení, titul Ing. Karel Jungwirth DrSc.
za
- funkce ředitel ústavu
- telefon 26605 2121
- mobil
- fax 28689 0509
- email jungwirth@fzu.cz 

IČ organizace	403
Obchodní jméno - název	Univerzita Palackého v Olomouci
Zkratka názvu	UP Olomouc 
Role organizace	příjemce
Vazba na organizaci	403
Druh organizace	Veřejná nebo státní vysoká škola (zákon č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (o vysokých školách))

Adresa sídla, spojení na organizaci


- ulice, čp./č.or. Křížkovského 8/
- PSČ, obec 77146 Olomouc
- stát Česká republika
- telefon 585 631 001
- http:// www.upol.cz

Bankovní spojení

- DIČ
- banka kód, název 0100 - KB Olomouc
- číslo účtu, sp.symbol 19-1096330227,

Statutární zástupce

- titul před, jméno, příjmení, titul Prof. MUDr. PhDr. Jana Mačáková CSc.
za
- funkce rektorka
- telefon 585 631 001
- mobil
- fax 585 222 731
- email rektor@upol.cz 

IČ organizace	404
Obchodní jméno - název	Univerzita Pardubice
Zkratka názvu	UPA 
Role organizace	příjemce
Vazba na organizaci	404
Druh organizace	Veřejná nebo státní vysoká škola (zákon č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (o vysokých školách))


Adresa sídla, spojení na organizaci


- ulice, čp./č.or. Studentská 95/
- PSČ, obec 53210 Pardubice
- stát Česká republika
- telefon 466036553
- http:// www.upce.cz

Bankovní spojení

- DIČ
- banka kód, název 0100 - KB Pardubice
- číslo účtu, sp.symbol 37030561,

Statutární zástupce

- titul před, jméno, příjmení, titul Prof. Ing. Miroslav Ludwig CSc.
- za
- funkce rektor
- telefon 466036553
- mobil
- fax 466036466
- email rektor@upce.cz 

IČ organizace	405
Obchodní jméno - název	Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
Zkratka názvu	VŠCHT 
Role organizace	spolupříjemce
Vazba na organizaci	405
Druh organizace	Veřejná nebo státní vysoká škola (zákon č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (o vysokých školách))

Adresa sídla, spojení na organizaci

- ulice, čp./č.or. Technická / 5
- PSČ, obec 16628 Praha 6 - Dejvice
- stát Česká republika
- telefon 220 441 111
- http:// www.vscht.cz

Bankovní spojení

- DIČ
- banka kód, název 0300 - ČSOB Praha
- číslo účtu, sp.symbol 130197294, 556040600

Statutární zástupce

- titul před, jméno, příjmení, titul Prof. Ing. Vlastimil Růžička CSc.
za
 - funkce rektor
 - telefon 220 444 116
 - mobil
 - fax 220 445 018
 - email vlastimil.ruzicka@vscht.cz 
-

2.1.2. ŘEŠITELSKÝ TÝM

Celé jméno, RČ **Banáš Pavel**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Univerzita Palackého v Olomouci
Pracovního poměr, funkce - 100%

Celé jméno, RČ **Brettlová Pavlína CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 10%

Celé jméno, RČ **Hrobárik Tomáš SK**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení hrobarik@uochb.cas.cz
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 10%

Celé jméno, RČ **Mlčochová Petra CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 68%

Celé jméno, RČ **Pluháčková Kristýna**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 10%

Celé jméno, RČ **Sklenovský Petr**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Univerzita Palackého v Olomouci
Pracovního poměr, funkce - 100%

Celé jméno, RČ	Alexandrová Zuzana, Mgr.
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	- 45%

Celé jméno, RČ **Bendová Lada Mgr.**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 45%

Celé jméno, RČ **Bludský Ota RNDr. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 38%

Celé jméno, RČ **Bulánek Roman Ing. PhD. CZ**
Role osoby při řešení projektu řešitel
Spojení 466037048 roman.bulanek@upce.cz
Příslušnost k organizaci Univerzita Pardubice
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 40

Celé jméno, RČ **Čajan Michal RNDr. Ph.D. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Univerzita Palackého v Olomouci
Pracovního poměr, funkce - 40%

Celé jméno, RČ **Čapek Petr Mgr.**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Černý Jiří Ing. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Chalupský Jakub Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu

Spojení

Příslušnost k organizaci

Pracovního poměr, funkce

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

- 45%

Celé jméno, RČ **Dobeš Petr Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 45%

Celé jméno, RČ **Drobná Helena Ing. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení 466037052 helena.drobna@upce.cz
Příslušnost k organizaci Univerzita Pardubice
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 50%

Celé jméno, RČ **Fanfrlík Jindřich Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Fekete Ladislav Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Fyzikální ústav AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 30%

Celé jméno, RČ **Havlas Zdeněk RNDr. DrSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení 220 183 333 havlas@uochb.cas.cz
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 38%

Celé jméno, RČ **Hobza Pavel Prof. Ing. DrSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu řešitel - koordinátor (LC)
Spojení +420 220 410 311 +420 220 410 320 pavel.hobza@uochb.cas.cz
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Hocek Michal Ing. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu

Spojení

hocek@uochb.cas.cz

Příslušnost k organizaci

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Pracovního poměr, funkce

- 38%

Celé jméno, RČ **Jirásková Jana Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 68%

Celé jméno, RČ **Jungwirth Pavel Doc. Mgr. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení 220 410 314
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Kabeláč Martin Mgr. PhD. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Kadlec Filip Mgr. PhD. 7105230209 CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení 266052176 kadlecf@fzu.cz
Příslušnost k organizaci Fyzikální ústav AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 35%

Celé jméno, RČ **Klusák Vojtěch Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Kolafa Jiří Doc. RNDr. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení jiri.kolafa@vscht.cz
Příslušnost k organizaci Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 50%

Celé jméno, RČ **Konvalinka Jan Doc. RNDr. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu

Spojení

220 183 218 konvalinka@uochb.cas.cz

Příslušnost k organizaci

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Pracovního poměr, funkce

kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Kožíšek Milan RNDr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Král Vladimír Prof. RNDr. CSc CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 50%

Celé jméno, RČ **Kubař Tomáš Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 45%

Celé jméno, RČ **Kučera Jan Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 45%

Celé jméno, RČ **Kuchař Martin Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 45%

Celé jméno, RČ **Kužel Petr RNDr. PhD. 6705110390 CZ**
Role osoby při řešení projektu řešitel
Spojení 26605 2176 28689 0415 kuzelp@fzu.cz
Příslušnost k organizaci Fyzikální ústav AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 35

Celé jméno, RČ **Kývala Mojmír Mgr. PhD. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu

Spojení

Příslušnost k organizaci

Pracovního poměr, funkce

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Labík Stanislav Prof. Ing. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 50%

Celé jméno, RČ **Malihevsky Anatol Prof. Ing. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu řešitel
Spojení anatol.malihevsky@vscht.cz
Příslušnost k organizaci Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace -

Celé jméno, RČ **Mikulová Adriana Mgr. SK**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Minofar Babak Mgr. IR**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Míšek Jiří Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Mucha Martin Mgr. SK**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Muchová Eva RNDr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu

Spojení

Příslušnost k organizaci

Pracovního poměr, funkce

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Nachtigall Petr Doc. RNDr. PhD. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Nachtigallová Dana RNDr. PhD. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Němec Hynek Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Fyzikální ústav AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 27%

Celé jméno, RČ **Otyepka Michal RNDr. Phd.**
Role osoby při řešení projektu řešitel
Spojení otyepka@aix.upol.cz
Příslušnost k organizaci Univerzita Palackého v Olomouci
Pracovního poměr, funkce -

Celé jméno, RČ **Pačes Ondřej Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Pokorná Jana Ing CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 60%

Celé jméno, RČ **Řeha David Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu

Spojení

Příslušnost k organizaci

Pracovního poměr, funkce

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

kmenový pracovník organizace - 20%

Celé jméno, RČ **Rejnek Jaroslav Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 45%

Celé jméno, RČ **Řezáč Jan Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Roeselová Martina RNDr. PhD. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Ronen Shai Mgr. IL**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 45%

Celé jméno, RČ **Rosenberg Ivan Ing. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 15%

Celé jméno, RČ **Rovenská Miroslava Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 68%

Celé jméno, RČ **Rulíšek Lubomír Mgr. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu

Spojení

Příslušnost k organizaci

Pracovního poměr, funkce

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ	Šácha Pavel Mgr. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 68%

Celé jméno, RČ	Schneider Bohdan Ing. CSc. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 19%

Celé jméno, RČ	Šedivcová Tereza Mgr. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ	Sehnal Petr Mgr. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ	Šilhár Peter Mgr. SK
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	- 45%

Celé jméno, RČ	Špirko Vladimír Ing. DrSc. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ	Šponer Jiří Doc. RNDr. DrSc. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu

Spojení

Příslušnost k organizaci

Pracovního poměr, funkce

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

kmenový pracovník organizace - 19%

Celé jméno, RČ **Štambaský Jan Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce - 45%

Celé jméno, RČ **Stará Irena RNDr. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Starý Ivo RNDr. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Stříšovský Kvido Ing. PhD. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Svozil Daniel Mgr. PhD. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ **Vácha Robert Mgr. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu
Spojení
Příslušnost k organizaci Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ **Vondrášek Jiří RNDr. CSc. CZ**
Role osoby při řešení projektu člen řešitelského týmu

Spojení

Příslušnost k organizaci

Pracovního poměr, funkce

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ	Vrábel Milan Mgr. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ	Vrbka Luboš Mgr. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 45%

Celé jméno, RČ	Žďánská Petra Mgr. PhD. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 38%

Celé jméno, RČ	Zendlová Lucie Ing. CZ
Role osoby při řešení projektu	člen řešitelského týmu
Spojení	
Příslušnost k organizaci	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Pracovního poměr, funkce	kmenový pracovník organizace - 45%

2.2. PLNĚNÍ DÍLČÍCH CÍLŮ

Za spoluřešitele ÚOCHB AV ČR, Praha:

i) Teoretické studium sbalování proteinů

Projekt pokračuje úspěšně, publikovali jsme jednu studii v JACS, další práce jsou připraveny k odeslání.

ii) Teoretické studium DNA

Projekt pokračuje úspěšně, první publikace popisující interakci ligandu s DNA vyjde v lednu 2006 v Chem. Eur. J., další studie popisující interakce analogů bází je v tisku ve stejném časopise.

iii) Určení konformace peptidů

Projekt pokračuje úspěšně, první publikace vyšla v Chem. Eur. J. a byla oceněna jako „Very important paper“, další studie jsou rozpracovány.

iv) Teoretické studium interakce ligand – protein, protein-protein

Projekt pokračuje úspěšně a první studie popisující interakci roscovitinu s proteinem je v recenzním řízení v Chem. Eur. J.

v) Afinita iontů k vodným rozhraním

Projekt se úspěšně rozšiřuje. Závěry, týkající se rozhraní voda-vzduch byly shrnuty do přehledného článku v Chem. Rev. (v tisku). Publikace týkající se vazby iontů k proteinům je v recenzním řízení v J. Phys. Chem. Probíhají první výpočty afinity iontů k fosfolipidovým membránám a v přípravě je projekt vazby iontů k RNA.

vi) Koordinace a distribuce iontů kovů v molekulových sítích

Úzké propojení experimentálního přístupu se úspěšně rozvíjí. V roce 2005 byla publikována jedna společná experimentální a teoretická práce, další společné práce jsou připravovány.

vii) Popis reakčních mechanismů metaloproteinů

Projekt úspěšně pokračuje v těsné spolupráci se dvěma experimentálními pracovišti, z nichž jedno je součástí centra. Práce byly publikovány Inorg. Chem., Biochemistry a J. Comput. Chem.

viii) Studium fotochemických reakcí

Projekt pokračuje úspěšně a v plánovaném rozsahu. Výsledky byly publikovány v Mol. Phys. a rozsáhlý souhrnný článek se objevil jako samostatná kapitola v knize Computational Methods in Photochemistry.

ix) Vývoj nových nukleobází a nukleosidů

Projekt pokračuje úspěšně zatím vývojem metodiky syntéz C-nukleosidů. Výsledky částečně publikovány v Eur. J. Org. Chem. a další rukopis se připravuje.

x) Modifikované a značené oligonukleotidy

Projekt pokračuje úspěšně zatím vývojem metodiky syntéz monomerů a studiím inkorporace. Publikace budou až později.

xi) Příprava nových helikálních aromátů a studium vodivosti jejich derivátů

V úvodní části projektu byl kladen důraz na rozvoj syntetické metodologie pro přípravu vyšších helicenů v racemické i neracemické formě. Tato část bude publikována v Pure Appl. Chem. (přijato do tisku) a další dvě publikace jsou připravovány k odeslání do tisku. Byly zahájeny výpočty struktury a energie helicenů a jejich derivátů a výsledky jsou připravovány ke zveřejnění.

Za spoluřešitele VŠCHT, Praha:

i) Studium vnitřní struktury a termodynamických vlastností tekutin

Pod pojmem vnitřní struktura tekutin se rozumí průměrné vzájemné rozmístění molekul plynů, kapalin a jejich směsí. Struktura je prekvizitou termodynamického chování. Projekt se úspěšně rozvíjí, o čemž svědčí výstupy v roce 2005 a práce připravené ke zveřejnění v roce 2006. V roce 2005 jsme zveřejnili 5 článků v prestižních mezinárodních časopisech. Další 4 články jsou v přípravě. Vedle toho jsme prezentovali 4 příspěvky na mezinárodní konferenci EMLG/JMLG týkající se výše uvedené tematiky. Těmto tématu byly věnovány 3 zvané přednášky (2 ve Španělsku, 1 v Německu).

ii) Počítačová studie vodivosti iontových kapalin

Nový, úspěšně se rozvíjející projekt. Článek je v přípravě.

iii) Molekulová dynamika polarizovatelných modelů

Rovněž nový, úspěšně se rozvíjející projekt. Zatím jedna přednáška, článek je v přípravě.

iv) Byly navrženy a syntetizovány ve vodě rozpustné deriváty porfyrinů a expandovaných porfyrinů pro studium interakcí s DNA a ODN za fyziologických podmínek

v) Byla zjištěna schopnost safyriinových derivátů interagovat s fosfodiesterovou vazbou a

vi) usnadňovat její hydrolýzu

vii) Byly navrženy a připraveny konjugáty porfyrinů s alkaloidy a studována specifita jejich interakce s vybranými modelovými proteiny a DNA

viii) Byly připraveny bis a tetrakis deriváty distamycinu a studován vliv spojovacího segmentu na specifitu interakce s DNA a AT, versus CG oligonukleotidových duplexů.

ix) Byly připraveny a testovány fluorescenčně značené distamycinové deriváty jako receptory pro tvorbu optických biosensorů

x) Bylo studováno agregační chování modelových karboranových ametalokarboranových struktur

xi) Byla připravena serie karboranových a metalokarboranových derivátů s cílem vytvořit specifické inhibitory enzymu NOS

xii) Byla studována isoform specifická inhibice enzymu nitric oxide syntázy NOS pomocí porfyrinových konjugátů

xiii) Byla studována isoform specifická inhibice enzymu nitric oxide syntázy NOS pomocí derivátů karboranů a metalokarboranů

xiv) Byly připraveny kvarternizované oligoTrogerovy báze jako nové strukturní jednotky pro interakci s biopolymery

Za spoluřešitele Univerzita Pardubice:

i) Charakterizace kationtových center zeolitů pomocí teplotně programovaných technik

Projekt se úspěšně rozvíjí. Byly připraveny sady Cu-MFI a Cu-FER zeolitů a prostudovány jejich TPD a TPR křivky. Informace získané z kinetických modelování experimentálních křivek a srovnání výsledků s kvantově mechanickými modely byly publikovány v jednom odborném článku a prezentovány na dvou mezinárodních konferencích. Další odborný článek je připravován.

ii) IČ spektroskopie „probe molekul“ adsorbovaných na Me⁺-zeolitech

Projekt se úspěšně rozvíjí. IČ spektroskopie byla použita pro studium karbonylů na Cu⁺, Li⁺, Na⁺ a K⁺ iontech v MFI a FER zeolitech. Porovnání experimentálních spekter karbonylů s přesnými výpočty spektroskopických charakteristik přispělo k pochopení vlastností adsorpčních center v molekulových sítích a k interpretaci jednotlivých vibračních pásů. Výsledky jsou součástí jednoho článku, jednoho příspěvku ve sborníku z konference a tří prezentací na mezinárodních konferencích. V současné době je další práce připravována a jedna je zaslaná do tisku.

iii) Mikrokolorimetrické měření adsorpčních tepel

Projekt je v přípravě. Pořízení mikrokolorimetru z investičních zdrojů výzkumného centra je plánováno na rok 2006. V roce 2005 byla započata stavba vakuové napouštěcí linky a podniknuta zahraniční cesta spojená s návštěvou pracovišť zabývajících se mikrokolorimetrií a získáním praktických zkušeností s provozem tohoto zařízení.

Za spoluřešitele Univerzita Palackého, Olomouc:

i) Stabilizace terciární struktury proteinů

Na modelovém systému p18INK4c jsme posoudili význam jednotlivých příspěvků ke Gibbsově stabilizační energii, výsledky projektu jsou v recenzním řízení v J. Phys. Chem. B

ii) Interakce protein-protein, protein-inhibitor

Projekty v oblasti interakcí cyklin-dependentních kinas s jejich regulačními podjednotkami a purinovými inhibitory navázali na náš předchozí výzkum, výsledky získané v této oblasti byly přijaty do tisku v J. Biol. Chem.

iii) Studium enzymové katalýzy

V roce 2005 jsme zahájili spolupráci se zahraničním partnerem (skupina prof. P. Carloniho, SISSA/ISAS, Trieste, Itálie) a jejím rámci je studována hydrolytická dehalogenace katalyzované enzymy haloalkan dehalogenasami. Výsledky práce se připravují pro odeslání k recenznímu řízení.

Za spoluřešitele FZÚ AV ČR, Praha:

i) THz mikroskopie biologických struktur v blízkém poli

Navrhli a ukázali jsme nový přístup k mikroskopii v blízkém poli využitelný v širokém frekvenčním pásmu od mikrovln po terahertzovou oblast a vhodný pro mikroskopii a spektroskopii biologických objektů. Při experimentech jsme dosáhli prostorového rozlišení 20 mikronů v široké spektrální oblasti (což odpovídá $\lambda/200$ pro 80 GHz). Výstupy: patentová přihláška, odborný článek, několik konferenčních příspěvků, byl postaven nový experiment

ii) Nelineární procesy fotoionizace plynů a jejich dynamika

Poprvé jsme ukázali, že časově rozlišená terahertzová spektroskopie je vhodným nástrojem pro přímé pozorování fotoionizace a generace elektronového plazmatu v plynech. Plasma bylo vytvořeno v plynném kyslíku excitovaném fokusovanými femtosekundovými pulsy. Ukazujeme, že dominantním fotoionizačním mechanismem při excitaci u 400 nm je vícefotonová absorpce, zatímco při excitaci u 800 nm převládá generace plazmatu vlivem silného elektrického pole. Výstupy: článek, přednáška na konferenci

iii) Dynamika přenosu elektronů v polárních kapalinách bezprostředně po fotoionizaci

Experimenty jsou v přípravě

iv) THz emise z polymerních systémů a adsorbovaných molekulárních vrstev na povrchu kovů

Pomocí terahertzové spektroskopie jsme studovali emisi terahertzového záření vzniklého optickým usměrněním femtosekundových laserových pulsů na tenkých zlatých vrstvách. Experimenty umožnily určit složky tenzoru nelineární susceptibility a dokázaly nelokální charakter nelineární odezvy. Výstupy: 2 přednášky na konferencích

Výsledky řešení projektu za sledované období

V tomto komentáři přikládáme plné citace všech publikací uvedených v tabulce:

Za spoluřešitele ÚOCHB AV ČR, Praha:

1. Tůma, L. - Jeníček, D. - Jungwirth, Pavel

Propensity of heavier halides for the water/vapor interface revisited using the Amoeba force field. Chemical Physics Letters. Roč. 411, - (2005), s. 70-74.

2. Winter, B. - Weber, R. - Hertel, I. V. - Faubel, M. - Jungwirth, Pavel - Brown, E. C. - Bradforth, S. E. Electron binding energies of aqueous alkali and halide ions: EUV photoelectron spectroscopy of liquid solutions and combined ab initio and molecular dynamics calculations.

Journal of the American Chemical Society. Roč. 127, č. 19 (2005), s. 7203-7214.

3. Petersen, P. B. - Saykally, R. J. - Mucha, Martin - Jungwirth, Pavel

Enhanced concentration of polarizable anions at the liquid water surface: SHG spectroscopy and MD simulations of sodium thiocyanide.

Journal of Physical Chemistry. B. Roč. 109, - (2005), s. 10915-10921.

4. Zierkiewicz, W. - Jurečka, Petr - Hobza, Pavel

On differences between hydrogen bonding and improper blue-shifting hydrogen bonding.

Chemphyschem. Roč. 6, č. 4 (2005), s. 609-617.

5. Gopalakrishnan, S. - Jungwirth, Pavel - Tobias, D. J. - Allen, H. C.

Air-liquid interfaces of aqueous solutions containing ammonium and sulfate: Spectroscopic and molecular dynamics studies.

Journal of Physical Chemistry. B. Roč. 109, - (2005), s. 8861-8872.

6. Minofar, B. - Vrbka, Luboš - Mucha, Martin - Jungwirth, Pavel - Yang, X. - Wang, X. B. - Fu, Y. J. - Wang, L. S.

- Interior and interfacial aqueous solvation of benzene dicarboxylate dianions and their methylated analogues: A combined molecular dynamics and photoelectron spectroscopy study.
Journal of Physical Chemistry. A. Roč. 109, - (2005), s. 5042-5049.
7. Brown, E. C. - Mucha, Martin - Jungwirth, Pavel - Tobias, D. J.
Structure and vibrational spectroscopy of salt water/air interfaces: Predictions from classical molecular dynamics simulations.
Journal of Physical Chemistry B. Roč. 109, - (2005), s. 7934-7940.
8. Kabeláč, Martin - Zendlová, Lucie - Řeha, David - Hobza, Pavel
Potential energy surfaces of an adenine-thymine base pair and its methylated analogue in the presence of one and two water molecules: Molecular mechanics and correlated ab initio study.
Journal of Physical Chemistry. B. Roč. 109, - (2005), s. 12206-12213.
9. Winter, B. - Weber, R. - Hertel, I. V. - Faubel, M. - Vrbka, Luboš - Jungwirth, Pavel
Effect of bromide on the interfacial structure of aqueous tetrabutylammonium iodide: Photoelectron spectroscopy and molecular dynamics simulations.
Chemical Physics Letters. Roč. 410, - (2005), s. 222-227.
10. Crews, B. - Abo-Riziq, A. - Grace, L. - Callahan, M. - Kabeláč, Martin - Hobza, Pavel - Vries de, M. S.
IR-UV double resonance spectroscopy of guanine-H₂O clusters.
Physical Chemistry Chemical Physics. Roč. 7, - (2005), s. 3015-3020.
11. Mrázková, Eva - Hobza, Pavel - Bohl, M. - Gauger, D. R. - Pohle, W.
Hydration-induced changes of structure and vibrational frequencies of methylphosphocholine studied as a model of biomembrane lipids.
Journal of Physical Chemistry B. Roč. 109, - (2005), s. 15126-15134.
12. Vieceli, J. - Roeselová, Martina - Potter, N. - Dang, L. X. - Garrett, B. C. - Tobias, D. J.
Molecular dynamics simulations of atmospheric oxidants at the air-water interface: Solvation and accommodation of OH and O₃.
Journal of Physical Chemistry. B. Roč. 109, - (2005), s. 15876-15892.
13. Rejnek, Jaroslav - Hanus, Michal - Kabeláč, Martin - Ryjáček, Filip - 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. 4. Uracil and thymine.
Physical Chemistry Chemical Physics. Roč. 7, - (2005), s. 2006-2017.
14. Černý, Jiří - Hobza, Pavel
The X3LYP extended density functional accurately describes H-bonding but fails completely for stacking.
Physical Chemistry Chemical Physics. Roč. 7, - (2005), s. 1624-1626.
15. Horn, Martin - Marešová, Lucie - Rulišek, Lubomír - Máša, Martin - Vasiljeva, O. - Turk, B. - Gan-Erdene, T. - Baudyš, Miroslav - Mareš, Michael
Activation processing of cathepsin H impairs recognition by its propeptide.
Biological Chemistry. Roč. 386, - (2005), s. 941-947.
16. Fárník, Michal - Nahler, N. H. - Buck, U. - Slavíček, Petr - Jungwirth, Pavel
Photodissociation of HBr on the surface of Ar-n clusters at 193 nm.
Chemical Physics. Roč. 315, 1-2 (2005), s. 161-170.
17. Vrbka, Luboš - Jungwirth, Pavel
Brine rejection from freezing salt solutions: A molecular dynamics study.
Physical Review Letters. Roč. 95, - (2005), s. 14851-4.

18. Zahradník, Rudolf - Srnec, Martin - Havlas, Zdeněk
Electronic spectra of conjugated polyynes, cumulenes and related systems: A theoretical study.
Collection of Czechoslovak Chemical Communications. Roč. 70, - (2005), s. 559-578.
19. Hocek, Michal - Pohl, Radek - Klepetářová, Blanka
A new modular and practical methodology for the synthesis of 4- or 3- substituted phenyl C-nucleosides.
European Journal of Organic Chemistry. -, č. 21 (2005), s. 4525-4528.
20. Rulíšek, Lubomír - Solomon, E. I. - Ryde, U.
A combined quantum and molecular mechanical study of the O₂ reductive cleavage in the catalytic cycle of multicopper oxidases.
Inorganic Chemistry. Roč. 44, č. 16 (2005), 5612-5628.
21. Rulíšek, Lubomír - Šebek, P. - Havlas, Zdeněk - Hrabal, R. - Čapek, P. - Svatoš, Aleš
An experimental and theoretical study of stereoselectivity of furan-maleic anhydride and furan-maleimide Diels-Alder reactions.
Journal of Organic Chemistry. Roč. 70, č. 16 (2005), 6295-6302.
22. Žďánská, Petra - Moiseyev, N.
Hartree-Fock orbitals for complex-scaled configuration interaction calculation of highly excited Feshbach resonances.
Journal of Chemical Physics. Roč. 123, - (2005), 1941051-1941058.
23. Bludský, Ota - Šilhan, Martin - Nachtigall, Petr - Bucko, T. - Benco, L. - Hafner, J.
Theoretical investigation of CO interaction with copper sites in zeolites: Periodic DFT and hybrid quantum mechanical/interatomic potential function study.
Journal of Physical Chemistry. B. Roč. 109, - (2005), 9631-9638.
24. Bludský, Ota - Nachtigallová, Dana - Bulánek, R. - Nachtigall, Petr
Combined theoretical and experimental study of the site-specificity of vibrational dynamics of CO adsorbed on monovalent metal cations in zeolites.
Studies in Surface Science and Catalysis. Roč. 158, - (2005), 625-632.
25. Alexandrová, Zuzana - Starý, Ivo - Stará, Irena - Sehnal, Petr - Šaman, David
Synthetic studies leading to helically chiral compounds.
Chemické listy. Roč. 99, č. 11 (2005), s. 829.
26. Andronova, Angelina - Stará, Irena - Starý, Ivo
Syntéza nového typu neracemických helicenům podobných látek se dvěma chirálními centry.
Chemické listy. Roč. 99, č. 11 (2005), 829-830.
27. Míšek, Jiří - Teplý, Filip - Stará, Irena - Starý, Ivo - Šaman, David
Synthesis of helically chiral heteroaromatics: an easy access to azahelicene derivatives.
Chemické listy. Roč. 99, č. 11 (2005), s. 860-7.
28. Sehnal, Petr - Starý, Ivo - Stará, Irena - Šaman, David - Alexandrová, Zuzana
Diastereoselective synthesis of [11]helicene-like molecules via double [2+2+2] cycloisomerization.
Chemické listy. Roč. 99, č. 11 (2005), s. 867-8.
29. Kučera, Jan - Nachtigall, Petr
27Al NMR chemical shifts do not correlate with average T-O-T angles: Theoretical study of MCM-58 zeolite.
Studies in Surface Science and Catalysis. Roč. 158, - (2005), 917-924.
30. Kučera, Jan - Nachtigall, Petr - Nachtigall, Petr

A simple correlation between average T-O-T angles and ^{27}Al MAS NMR chemical shifts does not hold in high-silica zeolites.

Microporous and Mesoporous Materials. Roč. 85, - (2005), 279-283.

31. Wahab, A. - Mahiuddin, S. - Hefter, G. - Kunz, W. - Minofar, Babak - Jungwirth, Pavel
Ultrasonic velocities, densities, viscosities, electrical conductivities, Raman spectra, and molecular dynamics simulations of aqueous solutions of $\text{Mg}(\text{OAc})_2$ and $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$: Hofmeister effects and ion pair formation.
Journal of Physical Chemistry. B. Roč. 109, - (2005), 24108-24120.

32. Stříšovský, Kvido - Jirásková, Jana - Mikulová, Adriana - Rulíšek, Lubomír - Konvalinka, Jan
Dual substrate and reaction specificity in mouse serine racemase: Identification of high-affinity dicarboxylate substrate and inhibitors and analysis of the beta-eliminase activity.
Biochemistry. Roč. 44, č. 39 (2005), 13091-13100.

33. Caffrey, C. R. - Plachá, L. - Bařinka, Cyril - Hradilek, Martin - Dostál, Jiří - Sajid, M. - McKerrow, J. H. - Majer, P. - Konvalinka, Jan - Vondrášek, Jiří
Homology modeling and SAR analysis of *Schistosoma japonicum* cathepsin D (SjCD) with statin inhibitors identify a unique active site steric barrier with potential for the design of specific inhibitors.
Biological Chemistry. Roč. 386, č. 4 (2005), 339-349.

34. Fanfrlík, Jindřich - Rejnek, Jaroslav - Hanus, Michal - Hobza, Pavel
Hydration Gibbs energies of nucleic acid bases determined by Gibbs energy perturbation, continuous and hybrid approaches.
Collection of Czechoslovak Chemical Communications. Roč. 70, č. 11 (2005), 1756-1768.

35. Řeha, David - Valdés, H. - Vondrášek, Jiří - Hobza, Pavel - Abu-Riziq, A. - Crews, B. - Vries de, M. S.
Structure and IR spectrum of phenylalanyl-glycyl-glycine tripeptide in the gas-phase: IR/UV experiments, ab initio quantum chemical calculations, and molecular dynamic Simulations.
Chemistry European Journal. Roč. 11, č. 23 (2005), 6804-6817.

36. Dabkowska, I. - Jurečka, Petr - Hobza, Pavel
On geometries of stacked and H-bonded nucleic acid base pairs determined at various DFT, MP2, and CCSD(T) levels up to the CCSD(T)/complete basis set limit level.
Journal of Chemical Physics. Roč. 122, č. 20 (2005), 204322-1-204322-9.

Za spoluřešitele VŠCHT, Praha:

1. Král, Vladimír - Lang, Kamil - Králová, Jarmila - Dvořák, Michal - Martásek, Pavel - Chin, Aileen O. - Andrievsky, Andrei - Lynch, Vincent - Sessler, Jonathan L.
Polyhydroxylated Sapphyrins: Multisite Non-metallic Catalyst for Activated Phosphodiester Hydrolysis.
Journal of the American Chemical Society (2005), accepted.

2. Matějčiček, P. - Cigler, P. - Procházka, K. - Král, V.
Molecular Assembly of Metallacarboranes in Water.
Langmuir (2005), accepted.

3. Malijevský, Alexander - Santos, Andrés
Structure of penetrable-rod fluids: Exact Properties and Two Analytic Theories.
The Journal of Chemical Physics (2005), in press.

4. Morávek, Pavel - Kolafa, Jiří - Hujo, Tomáš - Labík, Stanislav
Excess volume of homonuclear diatomic mixtures.
The Journal of Molecular Liquids (2005), available online 27 December.

5. Labík, Stanislav - Kolafa, Jiří - Malijevský, Anatol

Virial coefficients of hard spheres and hard disks up to the ninth.
Physical Review E 71, 021105 (2005).

6. Kolafa, Jiří

Nonanalytical Equation of State of the Hard Sphere fluid

Physical Chemistry, Chemical Physics (2005), available on line 21 November, DOI: 10.1039/b511999e

7. Kolafa, Jiří - Labík, Stanislav

Density expansion of the radial distribution and bridge functions of the hard sphere fluid.

Physical Chemistry, Chemical Physics, accepted.

8. Kolafa, Jiří

Gear formalism of the always stable predictor-corrector method for the molecular dynamics of polarizable molecules.

The Journal of Chemical Physics, 122, 164105 (2005).

Za spoluřešitele Univerzita Pardubice:

1. Nachtigall, Petr - Bludský, Ota - Nachtigallová, Dana - Čičmanec, Pavel - Drobná, Helena - Bulánek, Roman

Characterization of the Cu⁺ sites in FER Zeolites. Combined Computational and Experimental TPD Study. Studies in Surface Science and Catalysis, Roč. 158, (2005), 925-932

2. Drobná, Helena - Bulánek, Roman

FTIR study of CO adsorption on Cu⁺ ions in FER zeolites

Proceedings 7th AIZ Conference on Zeolite Science and Technology (editor G. Giordano), (2005), 63-66.

Za spoluřešitele Univerzita Palackého, Olomouc:

1. Bártová, I., Otyepka, M., Kříž, Z., Koča, J.

The mechanism of inhibition of the cyclin-dependent kinase-2 as revealed by the molecular dynamics study on the complex CDK2 with the peptide substrate HHASPRK

Protein Sci. 14, (2005), 445-451

2. Otyepka, M., Bártová, I., Kříž, Z., Koča, J.

Different mechanisms of CDK5 and CDK2 activation as revealed by CDK5/p25 and CDK2/Cyclin A dynamics

J. Biol. Chem. (2005) accepted

Za spoluřešitele FZÚ AV ČR, Praha

1. Klein, N. - Kadlec, Filip - Kužel, Petr - Lahl, P. - Poppe, U.

A metal-dielectric antenna for terahertz near-field imaging

J. Appl. Phys. 98, 014910 (2005)

2. Jin, B. B. - Kužel, Petr - Kadlec, Filip - Dahm, T. - Pogrebnyakov, A. V. - Redwing, J. M. - Xi, X. X. - Klein, N.

Terahertz surface impedance of epitaxial MgB₂ thin film

Applied Physics Letters 87, 092503 (2005).

3. Kužel, Petr

Terahertzová spektroskopie a její aplikace

Čes. Čas. Fyz. 55, 321-324 (2005).

4. Mics, Zoltán - Kadlec, Filip - Kužel, Petr - Jungwirth, Pavel - Bradforth, S. E. - Apkarian, V. A.

Nonresonant ionization of oxygen molecules by femtosecond pulses: plasma dynamics studied by time-resolved terahertz spectroscopy
J. Chem. Phys. 123, 104310 (2005)

5. Klein, N. - Kadlec, Filip - Kužel, Petr
Nahfeldsonde
patentová přihláška č. 10 2004 056 541.5 (Německý patentový úřad)

2.3.0. ZDŮVODNĚNÍ VYNALOŽENÝCH PROSTŘEDKŮ

Za spoluřešitele ÚOCHB AV ČR, Praha:

Provozní náklady ve výši 3,1 mil Kč byly spotřebovány zejména na dvě velké položky – drobný hmotný materiál (1,5 mil Kč) a cestovné (0,9 mil. Kč). DHM byl realizován jednak na opravy, úpravy a údržbu hmotného jmění (přibližně 350 osobních počítačů a počítačů v klastrech), jednak na nákup nové výpočetní techniky (10 ks AMD Athlon64 X2, 1 ks Opteron Dual s 24GB operační paměti RAM, 8 ks osobních počítačů včetně LCD monitorů). Významné prostředky alokované na cestovné nám dovolily realizovat návštěvu důležitých světových konferencí pro naše studenty (9 studentů navštívilo konference v USA). Osobní zkušenost s nejvýznamějšími vědeckými konferencemi považujeme za významnou součást výchovy PhD studentů. Je samozřejmé, že ve všech případech byla návštěva konference spojena s aktivní vědeckou realizací (nejméně formou plakátového sdělení). Za 0,3 mil. Kč byl realizován nákup software, 47 tis. Kč bylo věnováno na nákup literatury a 56 tis. Na opravy. Mzdová položka v centru je zanedbatelná a 22,6 tis. Kč bylo vyplaceno jako odměna řešiteli projektu.

Za spoluřešitele ÚFCH/VŠCHT Praha:

Osobní náklady byly použity k financování Mgr. Malijeuského, PhD (práce v oblasti DFT a MC simulací).

Další provozní náklady sloužily především pro upgrade PC clusteru (3xAthlon), klimatizaci pro počítačovou místnost a menší část na běžné kancelářské potřeby (papír, tonery, CD) a nákup literatury.

Cestovné a konferenční poplatky zahrnovaly konferenci Thermodynamics 2005 v Portugalsku a dále EMLG/JMLG v Praze.

Dále byl hrazen pobyt Dr. Krasky (Univ. Regensburg, SRN), Dr. Tscheliessniga (Univ. fuer Bodenkultur, Rakousko) a Prof. Fernanda del Río Haza (Univ. Autónoma Metropolitana, Mexiko).

Náklady na zveřejnění jsou na 1 publikaci v J. Chem. Phys. (J. Kolafa: JCP 122, 164105 (2005)).

Za spoluřešitele Univerzita Pardubice:

Prostředky na provozní náklady ve výši 269 tis. Kč byly použity pro nákup tlakových měřicích sond, vakuových kohoutů a ventilů pro stavbu vakuové napouštěcí linky, dále pro hrazení nákladů na zakoupení zeolitových matric, chemikálií a drobných laboratorních potřeb pro syntézu studovaných materiálů. Dále byly také zakoupeny plynové láhve s CO pro studium interakce CO se studovanými materiály. Osobní náklady byly v plánované výši vyplaceny dle pravidel jako odměny spoluřešiteli-koordinátorovi (doc. Bulánek). Cestovní náklady byly čerpány ve výši 70 tis. Kč pro hrazení aktivních účastí členů řešitelského týmu na těchto konferencích: 3rd FEZA Conference, srpen 2005, Praha (Bulánek, Drobná), XXXVII Symposium on Catalysis, Praha, listopad 2005 (Bulánek, Drobná), 7th AIZ Zeolite Science and Technology Conference joint with the 1st Czech-Italian Workshop on Catalysis and Zeolites, červen 2005, Camigliatello Silano, Itálie (Drobná), International Symposium Catalytic processes on advanced micro- and mesoporous materials, září 2005, Nessebar, Bulharsko (Drobná). Dále byla podniknuta cesta na dvě vědecká pracoviště v Německu (Department of Inorganic Chemistry, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck Gesellschaft, Faradayweg 4-6, 14195 Berlin, Germany (Dr. Sabine Wrabetz) a Laboratory for Thermophysical Properties (LTP GmbH), Institute at the University of Oldenburg, D-26111 Oldenburg, Germany (Prof. Kai Fischer)) kde jsou instalovány experimentální aparatury s mikrokolorimetry. Na těchto pracovištích jsme získávali praktické zkušenosti s přístrojem, který plánujeme v příštím roce koupit z investičních prostředků. Vzhledem k tomu, že dotace na projekt byly k dispozici až v druhém čtvrtletí roku

2005 nebylo možné vyčerpat cestovné prostředky zcela. Část finančních prostředků byla použita pro nákup drobného hmotného majetku a chemikálií. Náklady na zveřejnění výsledků byly použity pro tisk posterů. Režie byla čerpána dle plánu a v souladu s pravidly financování výzkumného centra.

Za spoluřešitele Univerzita Palackého, Olomouc:

Prostředky na provozní náklady ve výši 187,5 tis. Kč byly použity zejména na nákup výpočetní techniky a potřebného příslušenství. Domácí cestovné bylo čerpáno na služební cesty na spolupracující pracoviště a na dvoutýdenní pobyt studenta (P. Sklenovský) na pracovišti koordinátora. Zahraniční cestovné bylo využito na částečné pokrytí nákladů spojených s konferencí DFT 2005 v Ženevě, kterou jsme navštívili za účelem zisku zahraničních kontaktů. Jeden získaný kontakt poskytl možnost stáže M. Otyepky na pracovišti prof. Carloniho v SISSA/ISAS Trieste v Itálii (listopad 2005). Další finanční prostředky byly čerpány na správu výpočetních zdrojů a nákladů spojených s publikací výsledků. Odměna řešiteli a režie byly čerpány dle plánu a v souladu s pravidly financování výzkumného centra.

Za spoluřešitele FZÚ AV ČR, Praha:

Investiční prostředky byly určeny k vybudování nového experimentálního uspořádání pro mikroskopii v blízkém poli. Místo původně plánovaného měřiče výkonu byla zakoupena kamera s vysokým rozlišením Infinity X DeltaPix. Tato změna byla odsouhlasena ministerstvem (dopis z 28. června 2005).

Z provozních nákladů byl hrazen nákup následujících položek: počítač k řízení experimentu (70 tis.), sada IČ ochranných optických brýlí a zobrazovač IČ svazků (98 tis.), krystal LBO pro čerpací laser Nd:YLF (120 tis.), další optické, mechanické a elektronické prvky pro experiment (153 tis.).

Prostředky vyhrazené na cestovné nám umožnily navštívit několik významných konferencí: GDR-E THz Montpellier, Dyproso 2005 Český Krumlov, IRMMW-THz 2005 Williamsburg, JNOG 2005 Chambéry; každá účast byla spojena s prezentací výsledků formou přednášky nebo panelu. Dále byla v návrhu projektu odsouhlasena položka "Náklady na mezinárodní spolupráci" ve výši 60 tis. Kč. Tato položka se ve formulářích pro tuto zprávu nevyskytuje, proto jsme ji v tabulkách zahrnuli též do cestovních nákladů. Tyto prostředky umožnily zaplatit 3 týdenní pobyt dr. N. Kleina z Jülichu v naší laboratoři a uspořádat mezinárodní pracovní schůzku s představiteli spolupracujících laboratoří o budoucím rozvoji THz mikroskopie v blízkém poli.

Nákladů na údržbu hmotného majetku bylo použito k hrazení opravy čerpacího laseru.

23 tis. Kč bylo vyplaceno jako odměna řešiteli projektu.

Z poskytnuté účelové podpory zbylo 872,23 Kč, které byly vráceny MŠMT.

2.3.1. NÁKLADOVÉ TABULKY ZA JEDNOTLIVÉ ORGANIZACE

Rok

2005

Organizace

Fyzikální ústav AV ČR

Role organizace

příjemce

POLOŽKA UZNANÝCH NÁKLADŮ tis. Kč	Uznané náklady schválené tis. Kč	Náklady skutečně vynaložené tis. Kč	z toho skutečně hrazené z účelové podpory tis. Kč
F1. - Osobní náklady nebo výdaje na zaměstnance, kteří se podílejí na řešení projektu a jim odpovídající povinné zákonné odvody a případné příděly do FKSP	314	314	31
F2. - Náklady nebo výdaje na pořízení hmotného a nehmotného majetku (investice, kapitálové)	390	390	390
F3. - Náklady nebo výdaje na provoz a údržbu hmotného majetku používaného při řešení projektu	300	290	20
F4. - Další provozní náklady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	434	441	441
F5. - Náklady nebo výdaje na služby využívané v přímé souvislosti s řešením projektu	0	0	0
F6. - Náklady nebo výdaje na zveřejnění výsledků projektu včetně nákladů nebo výdajů na zajištění práv k výsledkům výzkumu	30	30	0
F7. - Cestovní náhrady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	210	212	212
F8. - Doplnkové (režijní) náklady nebo výdaje vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu, např. administrativní náklady, náklady na pomocný personál a infrastrukturu, energii a služby	135	135	135

neuvedené výše			
F9. CELKEM	1813	1812	1229

Rok

2005

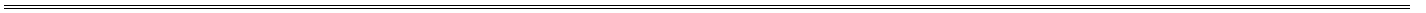
Organizace

Univerzita Palackého v Olomouci

Role organizace

příjemce

POLOŽKA UZNANÝCH NÁKLADŮ tis. Kč	Uznané náklady schválené tis. Kč	Náklady skutečně vynaložené tis. Kč	z toho skutečně hrazené z účelové podpory tis. Kč
F1. - Osobní náklady nebo výdaje na zaměstnance, kteří se podílejí na řešení projektu a jim odpovídající povinné zákonné odvody a případné přiděly do FKSP	258	697	12
F2. - Náklady nebo výdaje na pořízení hmotného a nehmotného majetku (investice, kapitálové)	0	0	0
F3. - Náklady nebo výdaje na provoz a údržbu hmotného majetku používaného při řešení projektu	0	0	0
F4. - Další provozní náklady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	225	278	188
F5. - Náklady nebo výdaje na služby využívané v přímé souvislosti s řešením projektu	0	22	22
F6. - Náklady nebo výdaje na zveřejnění výsledků projektu včetně nákladů nebo výdajů na zajištění práv k výsledkům výzkumu	30	0	0
F7. - Cestovní náhrady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	83	64	64
F8. - Doplnkové (režijní) náklady nebo výdaje vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu, např. administrativní náklady, náklady na pomocný personál a infrastrukturu, energii a služby neuvedené výše	36	36	36
F9. CELKEM	632	1097	322



Rok

2005

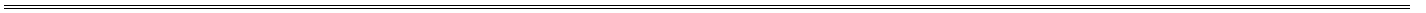
Organizace

Univerzita Pardubice

Role organizace

příjemce

POLOŽKA UZNANÝCH NÁKLADŮ tis. Kč	Uznané náklady schválené tis. Kč	Náklady skutečně vynaložené tis. Kč	z toho skutečně hrazené z účelové podpory tis. Kč
F1. - Osobní náklady nebo výdaje na zaměstnance, kteří se podílejí na řešení projektu a jim odpovídající povinné zákonné odvody a případné přiděly do FKSP	247	247	31
F2. - Náklady nebo výdaje na pořízení hmotného a nehmotného majetku (investice, kapitálové)	0	0	0
F3. - Náklady nebo výdaje na provoz a údržbu hmotného majetku používaného při řešení projektu	0	0	0
F4. - Další provozní náklady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	225	269	269
F5. - Náklady nebo výdaje na služby využívané v přímé souvislosti s řešením projektu	0	0	0
F6. - Náklady nebo výdaje na zveřejnění výsledků projektu včetně nákladů nebo výdajů na zajištění práv k výsledkům výzkumu	2	1	1
F7. - Cestovní náhrady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	113	70	70
F8. - Doplnkové (režijní) náklady nebo výdaje vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu, např. administrativní náklady, náklady na pomocný personál a infrastrukturu, energii a služby neuvedené výše	55	55	55
F9. CELKEM	642	642	426



Rok

2005

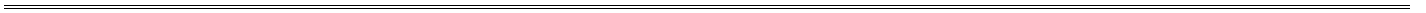
Organizace

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Role organizace

příjemce

POLOŽKA UZNANÝCH NÁKLADŮ tis. Kč	Uznané náklady schválené tis. Kč	Náklady skutečně vynaložené tis. Kč	z toho skutečně hrazené z účelové podpory tis. Kč
F1. - Osobní náklady nebo výdaje na zaměstnance, kteří se podílejí na řešení projektu a jim odpovídající povinné zákonné odvody a případné přiděly do FKSP	711	711	255
F2. - Náklady nebo výdaje na pořízení hmotného a nehmotného majetku (investice, kapitálové)	0	0	0
F3. - Náklady nebo výdaje na provoz a údržbu hmotného majetku používaného při řešení projektu	0	0	0
F4. - Další provozní náklady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	225	225	225
F5. - Náklady nebo výdaje na služby využívané v přímé souvislosti s řešením projektu	0	0	0
F6. - Náklady nebo výdaje na zveřejnění výsledků projektu včetně nákladů nebo výdajů na zajištění práv k výsledkům výzkumu	15	15	15
F7. - Cestovní náhrady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	285	285	285
F8. - Doplnkové (režijní) náklady nebo výdaje vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu, např. administrativní náklady, náklady na pomocný personál a infrastrukturu, energii a služby neuvedené výše	84	84	84
F9. CELKEM	1320	1320	864



Rok

2005

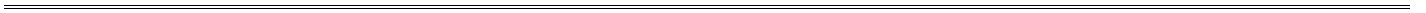
Organizace

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Role organizace

příjemce

POLOŽKA UZNANÝCH NÁKLADŮ tis. Kč	Uznané náklady schválené tis. Kč	Náklady skutečně vynaložené tis. Kč	z toho skutečně hrazené z účelové podpory tis. Kč
F1. - Osobní náklady nebo výdaje na zaměstnance, kteří se podílejí na řešení projektu a jim odpovídající povinné zákonné odvody a případné přiděly do FKSP	2621	2621	31
F2. - Náklady nebo výdaje na pořízení hmotného a nehmotného majetku (investice, kapitálové)	3470	3470	3414
F3. - Náklady nebo výdaje na provoz a údržbu hmotného majetku používaného při řešení projektu	0	0	0
F4. - Další provozní náklady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	2925	3317	3317
F5. - Náklady nebo výdaje na služby využívané v přímé souvislosti s řešením projektu	0	14	14
F6. - Náklady nebo výdaje na zveřejnění výsledků projektu včetně nákladů nebo výdajů na zajištění práv k výsledkům výzkumu	23	23	23
F7. - Cestovní náhrady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	1816	1410	1410
F8. - Doplnkové (režijní) náklady nebo výdaje vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu, např. administrativní náklady, náklady na pomocný personál a infrastrukturu, energii a služby neuvedené výše	762	762	762
F9. CELKEM	11617	11617	8971



2.3.2. NÁKLADOVÁ TABULKA ZA PROJEKT

Rok

2005



POLOŽKA UZNANÝCH NÁKLADŮ tis. Kč	Uznané náklady schválené tis. Kč	Náklady skutečně vynaložené tis. Kč	z toho skutečně hrazené z účelové podpory tis. Kč
F1. - Osobní náklady nebo výdaje na zaměstnance, kteří se podílejí na řešení projektu a jim odpovídající povinné zákonné odvody a případné přídělky do FKSP	4151	4590	360
F2. - Náklady nebo výdaje na pořízení hmotného a nehmotného majetku (investice, kapitálové)	3860	3860	3804
F3. - Náklady nebo výdaje na provoz a údržbu hmotného majetku používaného při řešení projektu	300	290	20
F4. - Další provozní náklady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	4034	4530	4440
F5. - Náklady nebo výdaje na služby využívané v přímé souvislosti s řešením projektu	0	36	36
F6. - Náklady nebo výdaje na zveřejnění výsledků projektu včetně nákladů nebo výdajů na zajištění práv k výsledkům výzkumu	100	69	39
F7. - Cestovní náhrady vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu	2507	2041	2041
F8. - Doplňkové (režijní) náklady nebo výdaje vzniklé v přímé souvislosti s řešením projektu, např. administrativní náklady, náklady na pomocný personál a infrastrukturu, energii a služby neuvedené výše	1072	1072	1072
F9. CELKEM	16024	16488	11812

2.3.3. Seznam hmotného a nehmotného majetku pořízeného za sledované období

Pořadí	01
Název	Chromatograf Sp1 Biotage
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Pořizovací cena v tis. Kč	760
Uznaný náklad v tis. Kč	760
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	760
Datum dodání	28.7.2005
Datum zprovoznění	1.8.2005

Pořadí	02
Název	Chromatograf Sp1 Biotage
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Pořizovací cena v tis. Kč	760
Uznaný náklad v tis. Kč	760
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	760
Datum dodání	28.7.2005
Datum zprovoznění	1.8.2005

Pořadí	03
Název	Lyofilizátor Labconco
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Pořizovací cena v tis. Kč	518
Uznaný náklad v tis. Kč	518
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	518
Datum dodání	1.8.2005
Datum zprovoznění	1.8.2005

Pořadí	04
Název	Vakuová centrifuga Labconco
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Pořizovací cena v tis. Kč	513

Uznáný náklad v tis. Kč	513
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	513
Datum dodání	1.8.2005
Datum zprovoznění	1.8.2005

Pořadí	05
Název	Hlubokomrazící box Sanyo
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Požizovací cena v tis. Kč	313
Uznáný náklad v tis. Kč	313
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	313
Datum dodání	11.11.2005
Datum zprovoznění	1.11.2005

Pořadí	06
Název	Paralelní syntezátory Radley's
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Požizovací cena v tis. Kč	442
Uznáný náklad v tis. Kč	442
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	442
Datum dodání	5.12.2005
Datum zprovoznění	1.12.2005

Pořadí	07
Název	Příslušenství pro Sp1 Biotage
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Požizovací cena v tis. Kč	98
Uznáný náklad v tis. Kč	98
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	98
Datum dodání	11.8.2005
Datum zprovoznění	1.8.2005

Pořadí	08
Název	Disk 200 GB Maxtor - přísl. pro zálohování dat klastru
Podíl užití majetku pro řešení v %	100

Pořizovací cena v tis. Kč	10
Uznaný náklad v tis. Kč	10
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	10
Datum dodání	23.12.2005
Datum zprovoznění	1.12.2005

Pořadí	09
Název	Kamera Infinity X DeltaPix
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Pořizovací cena v tis. Kč	116
Uznaný náklad v tis. Kč	116
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	116
Datum dodání	3.6.2005
Datum zprovoznění	1.6.2005

Pořadí	10
Název	Lock-in zesilovač SR 850 a gated integrator SR 250
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Pořizovací cena v tis. Kč	254
Uznaný náklad v tis. Kč	254
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	254
Datum dodání	6.6.2005
Datum zprovoznění	1.6.2005

Pořadí	11
Název	Příslušenství pro Infinity X
Podíl užití majetku pro řešení v %	100
Pořizovací cena v tis. Kč	20
Uznaný náklad v tis. Kč	20
Uhrazeno z dotace v tis. Kč	20
Datum dodání	21.11.2005
Datum zprovoznění	1.12.2005

2.4. PŘEHLED ZMĚN, KTERÉ NASTALY

Pč.	Typ	Popis
-----	-----	-------

*

2.5. PLNĚNÍ SMLOUVY O SPOLUPRÁCI

Všechny smlouvy byly plněny v souladu se zadáním.

2.6. PLNĚNÍ PODMÍNEK PROGRAMU

Za spoluřešitele ÚOCHB AV ČR, Praha:

Na činnosti centra se podílejí tito studenti doktorských studijních programů:

Kvantově chemické výpočty: Mgr. David Řeha, Mgr. Jaroslav Rejnek, Ing. Lucie Zendlová, Mgr. Tomáš Kubař, Mgr. Eva Mrázková, Mgr. Jindřich Fanfrlík, Mgr. Jan Řezáč, Mgr. Shai Ronen

Teoretické výpočty: Ing. Jiří Černý

Modelování bazických zeolitů: Mgr. Jan Kučera

Solvatace v pórech molekulových sít: Mgr. Luboš Vrbka

Výpočty interakcí proteinů s inhibitory: Mgr. Petr Dobeš

Kvantově molekulová dynamika: Mgr. Martin Mucha

Simulace molekulové dynamiky: Mgr. Babak Minofar

Výpočty volné energie: Mgr. Robert Vácha

Vibrační dynamika: Mgr. Tereza Šedivcová

Syntézy modifikovaných nukleobází a nukleosidů: Mgr. Petr Čapek, Mgr. Peter Šilhár, Mgr. Jan Štambaský, Mgr. Milan Vrábel, Mgr. Martin Kuchař

Syntézy oligonukleotidů Mgr. Ondřej Pačes

Slabé mezimolekulové interakce v proteinech: Mgr. Vojtěch Klusák

Kvantová bioanorganická chemie: Mgr. Adriana Mikulová

Kvantově chemické výpočty excitovaných stavů: Mgr. Jakub Chalupský

Teoretický popis organické reaktivity: Mgr. Lada Bendová

Syntéza helikálních aromátů: Mgr. Petr Sehnal

Syntéza distribuovaných helicénů: Mgr. Zuzana, Alexandrová

Syntéza tetrasubstituovaných helicénů Mgr. Jiří Míšek

Expresy enzymů metabolismu neurotransmiterů: Mgr. Jana Jirásková

Studium vývoje rezistence u HIV pozitivních pacientů Mgr. Miroslava Rovenská

Glutamátcarboxypeptidasa II v nervovém systému: Mgr. Pavel Šácha

Dále se podílejí i studenti magisterských studijních programů:

Kvantově chemické výpočty: Pavlína Brettlová, Kristýna Pluháčková, Tomáš Hrobárik

Za spoluřešitele VŠCHT, Praha:

Máme tři studenty doktorských studijních programů:

1) Ing. Magda Francová - plně se podílí; minulý rok několik konferenčních příspěvků a jeden článek v přípravě

2) Ing. Jan Picálek - to samé.

3) PhD student Tomas Hujo. Skončil aspiranturu v zari 2005. Platí o nem totez, co o ostatnich.

Kromě toho se na aktivitách centra podílí jeden student magisterských studijních programů: M. Ončák, platí o něm totéž jako o předcházejících.

Za spoluřešitele Univerzita Pardubice:

Na pracovišti Univerzity Pardubice se do řešení úkolů výzkumného centra LC 512 zapojil doktorand Karel Frolich (školitelem je doc. Bulánek), který studuje interakce molekul CO s ionty alkalických kovů ve vysokosilikátových materiálech typu FER a MFI. Účelem experimentů je prostudovat tzv. "site-specificitu" vibrace molekuly CO v těchto komplexech a jejím prostřednictvím studovat lokalizaci a koordinaci jednomocných iontů v zeolitových materiálech.

Za spoluřešitele Univerzita Palackého, Olomouc:

Na řešení projektů výzkumného centra se podílejí studenti Mgr. studia (Bc. Petr Sklenovský 5. roč.) a PhD. studia (Mgr. Pavel Banáš).

Za spoluřešitele FZÚ AV ČR, Praha:

PhD studenti

Hynek Němec: šíření THz pulsů v nerovnovážných a nehomogenních prostředích; rezonanční struktury

Ladislav Fekete: Ultrarychlá polární dynamika v daleké infračervené oblasti: pevné látky

Milan Berta: THz mikroskopie a spektroskopie v blízkém poli

Diplomanti

Zoltán Mics (2006 začne PhD): Ultrarychlá polární dynamika v infračervené oblasti: plyny a kapaliny

VÝSLEDKY ŘEŠENÍ PROJEKTU

SEZNAM DOSTUPNÉ DOKUMENTACE vztahující se k dosaženým výsledkům

Číslo dokumentu (výsledku)	01
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Výskyt těžších halidových iontů na rozhraní voda/pára studovaný pomocí silového pole Amoeba.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Molekulově dynamické simulace vodných roztoků halidů sodných byly provedeny v povrchové geometrii pomocí moderního silového pole Amoeba.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Tůma, L. - Jeníček, D. - Jungwirth, Pavel
Číslo dokumentu (výsledku)	02
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Vazebné energie elektronu k vodným alkalickým a halidovým iontům: EUV fotoelektronová spektroskopie kapalných roztoků a kombinované ab initio a molekulově dynamické výpočty.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Přinášíme měřené vypočtené nejnižší vertikální vazebné energie elektronů k vodným alkalickým kationtům a halidovým aniontům.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Winter, B. - Weber, R. - Hertel, I. V. - Faubel, M. - Jungwirth, Pavel - Brown, E. C. - Bradforth, S. E.
Číslo dokumentu (výsledku)	03
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Zvýšená koncentrace polarizovatelných aniontů na vodních površích: SHG spektroskopie a MD simulace thiocyanátu sodného.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Předkládáme kombinovanou experimentální a teoretickou studii rozhraní

kapalina/vzduch vodného thiocyanátu sodného v různých koncentracích.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Petersen, P. B. - Saykally, R. J. - Mucha, Martin - Jungwirth, Pavel

Číslo dokumentu (výsledku) 04

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV)

J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku)v
českém jazyce

Rozdíly mezi vodíkovou vazbou a nepravou vodíkovou vazbou.

Původní jazyk dokumentu
(výsledku)

ANG

Popis výsledku

Byly zkoumány dvacet dva komplexy s vodíkovou vazbou a nepravou vodíkovou vazbou prostřednictvím metod HF, MP2, a B3LYP za použití 6-31G(d,p) a 6-311++G(d,p) bazí AO. Na rozdíl od standardní vodíkové vazby není původ nepravé vodíkové vazby stále ještě plně vysvětlen. V rozporu s často předpokládanou myšlenkou nemůže rozdílné chování komplexů s vodíkovou vazbou a nepravou vodíkovou vazbou vysvětlovat pouze elektrické pole protonového akceptoru. Zkrácení vodíkové vazby působením různých přitažlivých sil - disperzní nebo elektrostatické rovněž přispívá významným způsobem.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Zierkiewicz, W. - Jurečka, Petr - Hobza, Pavel

Číslo dokumentu (výsledku) 05

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV)

J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku)v
českém jazyce

Rozhraní vzduch-kapalina vodných roztoků obsahujících amoné a sulfátové ionty: Spektroskopická a molekulárně dynamická studie.

Původní jazyk dokumentu
(výsledku)

ANG

Popis výsledku

Výzkum rozhraní vzduch-kapalina vodných roztoků solí obsahujících amonium (NH_4^+) a sulfát (SO_4^{2-}) byl proveden pomocí simulací molekulové dynamiky a nelineární vibrační spektroskopie.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Gopalakrishnan, S. - Jungwirth, Pavel - Tobias, D. J. - Allen, H. C.

Číslo dokumentu (výsledku) 06

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV)

J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Vnitřní a povrchová solvatace benzenových dikarboxylových dianiontů a jejich metylovaných analog: Kombinovaná studie pomocí molekulové dynamiky a fotoelektronové spektroskopie.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Vodná solvatace benzenových dikarboxylových dianiontů byla studována pomocí fotoelektronové spektroskopie a simulací molekulové dynamiky.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Minofar, B. - Vrbka, Luboš - Mucha, Martin - Jungwirth, Pavel - Yang, X. - Wang, X. B. - Fu, Y. J. - Wang, L. S.
Číslo dokumentu (výsledku)	07
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Struktura a vibrační spektroskopie rozhraní slaný roztok/voda: Předpovědi simulací klasické molekulové dynamiky.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Předkládáme SFG spektra rozhraní vodného roztoku jodidu sodného, vypočtená pomocí metodologie vytvořené Moritou a Hynesem.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Brown, E. C. - Mucha, Martin - Jungwirth, Pavel - Tobias, D. J.
Číslo dokumentu (výsledku)	08
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Povrchy potenciální energie páru adenin-thymin v přítomnosti jedné a dvou molekul vody: studie na molekulově- mechanické a ab initio úrovni.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Povrchy potenciální energie párů bází adenin...thymin a jejich metylovaných derivátů v přítomnosti jedné a dvou molekul vody byly studovány metodou molekulové dynamiky- quenchingu. Nejstabilnější struktury byly dále reoptimizovány na korelované ab initio úrovni. Rostoucí počet molekul rozpouštědla a methylace vedou k upřednostnění patrových struktur nad planárními vodíkově vázanými komplexy.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Kabeláč, Martin - Zendlová, Lucie - Řeha, David - Hobza, Pavel
Číslo dokumentu (výsledku)	09

Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Vliv bromidu na povrchovou strukturu roztoků jodidu tetrabutyl amonného: Fotoelektronová spektroskopie a simulace molekulové dynamiky.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Solvatace povrchově aktivního jodidu tetrabutyl amonného ve vodě a v roztoku bromidu sodného byla studována pomocí VUV fotoelektronové spektroskopie a simulacemi molekulové dynamiky.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Winter, B. - Weber, R. - Hertel, I. V. - Faubel, M. - Vrbka, Luboš - Jungwirth, Pavel
Číslo dokumentu (výsledku)	10
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	IČ-UV spektroskopie s dvojitou resonancí pro system guanin-voda.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Byla změřena IČ-UV spectra pro system guanin-voda v rozsahu 3100-3800 cm ⁻¹ . Pro danou oblast byla rovněž vypočtena harmonická vibrační spectra na ab initio úrovni, která umožnila přiřadit jednotlivé vibrační módy. Byly nalezeny 2 monohydratované tautomery guaninu v enol formě a 1 ketoamino formě.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Crews, B. - Abo-Riziq, A. - Grace, L. - Callahan, M. - Kabeláč, Martin - Hobza, Pavel - Vries de, M. S.
Číslo dokumentu (výsledku)	11
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Hydratací indukované změny struktury a vibračních vlastností methylfosfocholinu, model membránového lipidu.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Charakteristiky polárních částí fosfolipidů a jejich interakce s vodou byly studovány pomocí infračervené spektroskopie a teoretických výpočtů. Hlavní proces, k němuž dochází při postupné hydrataci, je konformační změna molekuly metylfosfocholinu z těsně sbalené, která je v izolovaném stavu, na rozbalenou díky porušení intramolekulových vodíkových vazeb. Tato konformační změna je doprovázena dobře pozorovatelnými změnami ve

vibračních charakteristikách. Naznačený mechanismus konformačních změn indukovaných hydratací je pravděpodobně obecně platný pro všechny zwitterionty s relevantními intramolekulovými vodíkovými vazbami.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Mrázková, Eva - Hobza, Pavel - Bohl, M. - Gauger, D. R. - Pohle, W.

Číslo dokumentu (výsledku) 12

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV)

J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku)v
českém jazyce

Simulace molekulové dynamiky atmosférických oxidantů na rozhraní
vzduch/voda: Solvatace a akomodace OH a O3.

Původní jazyk dokumentu
(výsledku)

ANG

Popis výsledku

Komparativní studie rovnovážné solvatace OH, O3 a H2O ve vodě jejich akomodace z plynné fáze na vodním povrchu při 300 K s použitím kombinace ab initio výpočtů a molekulově dynamických simulací. Pro popis interakce OH a O3 s vodou byl vyvinut polarizabilní potenciál. Profil volné energie pro transport OH a O3 z plynné do kapalně fáze vykazuje zřetelné minimum v oblasti povrchu, nikoli však bariéru vzhledem k plně solvataci ve vodě.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Vieceli, J. - Roeselová, Martina - Potter, N. - Dang, L. X. - Garrett, B. C. -
Tobias, D. J.

Číslo dokumentu (výsledku) 13

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV)

J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku)v
českém jazyce

Báze nukleových kyselin a jejich tautomery v plynné fázi,
mikrohydratovaném prostředí a ve vodném roztoku - korelovaná ab initio
studie. Část čtvrtá. Uracil a thymin.

Původní jazyk dokumentu
(výsledku)

ANG

Popis výsledku

Keto a enol tautomery thyminu a uracilu byly teoreticky studovány v plynné fázi, v mikrohydratovaném prostředí a ve vodném roztoku. Solvatace byla popsána pomocí metod: termodynamická integrace, Conductor-like polarizable continuum model (C-PCM) a hybridního modelu (metoda C-PCM + explicitní molekuly vody). Byla provedena experimentální detekce tautomerů pomocí steady-state fluorescence.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Rejnek, Jaroslav - Hanus, Michal - Kabeláč, Martin - Ryjáček, Filip - Hobza,
Pavel

Číslo dokumentu (výsledku)	14
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	X3LYP funkcionál poskytuje přesný popis vodíkové vazby, ale selhává při popisu "stackové" interakce.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Výkonnost X3LYP funkcionálu byla testována na vodíkově vázaných a "stackových" párech bazí nukleových kyselin. Ze srovnání výsledků s přesnými interakčními energiemi vyplývá, že X3LYP systematicky selhává při popisu "stackové" interakce.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Černý, Jiří - Hobza, Pavel
Číslo dokumentu (výsledku)	15
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Aktivační procesing kathepsinu H brání interakci s propeptidem.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Studovali jsme inhibiční interakci fragmentů propeptidu se zralým kathepsinem H a rekombinantním kathepsinem H, který neobsahuje miniřetězec. Rozdíl v interakci u obou enzymů ukazuje, že v molekule kathepsinu H probíhají strukturní změny indukované během zrání, zejména tvorba miniřetězce. Tyto změny brání účinné inhibici zralého kathepsinu H jeho vlastním propeptidem.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Horn, Martin - Marešová, Lucie - Rulíšek, Lubomír - Máša, Martin - Vasiljeva, O. - Turk, B. - Gan-Erdene, T. - Baudyš, Miroslav - Mareš, Michael
Číslo dokumentu (výsledku)	16
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Fotodisociace HBr na povrchu klastrů argonu při 193nm.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Fotodisociační experimenty byly provedeny pro molekulu HBr absorbovanou na povrchích velkých argonových klastrů s průměrnou velikostí =159 při

disociační vlnové délce 193nm.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno Fárník, Michal - Nahler, N. H. - Buck, U. - Slavíček, Petr - Jungwirth, Pavel

Číslo dokumentu (výsledku) 17

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV) J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku)v
českém jazyce Vysolování z mrazicích roztoků: Molekulově dynamická studie.

Původní jazyk dokumentu
(výsledku) ANG

Popis výsledku Atmosféricky a technologicky velmi významný proces vysolování z mrznoucích roztoků je studován s tomovým rozlišením pomocí simulací molekulové dynamiky.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno Vrbka, Luboš - Jungwirth, Pavel

Číslo dokumentu (výsledku) 18

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV) J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku)v
českém jazyce Elektronická spektra konjugovaných polyynů, kumulenů a příbuzných systémů: teoretická studie.

Původní jazyk dokumentu
(výsledku) ANG

Popis výsledku Elektronická spektra uvedených systémů byla počítána pomocí časově závislé metody hustoty funkcionálu (TD DFT) a pro skupinu vybraných molekul též pomocí symetricky adaptované klastrové metody konfigurační interakce (SAC-CI). Byla srovnána vypočítaná a pokusná spektrální data. Ukázalo se, že TD DFT (s B3LYP) je spolehlivou metodou pro výpočet polohy absorpčních pásů v dlouhovlnné oblasti. Charakteristiky kumulenů se štěpí na dvě výrazně oddělené třídy: systémy se sudým (D2h) a lichým (D2d) počtem uhlíků. Pozornost byla věnována vlivu substituentů různého typu na polohu prvního intenzivního pásu polyynů a polyenů. Byly zkoumány (téměř lineární) závislosti vlnočtů prvých pásů na reciproké hodnotě počtu trojných či dvojných vazeb.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno Zahradník, Rudolf - Srnec, Martin - Havlas, Zdeněk

Číslo dokumentu (výsledku) 19

Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku)v českém jazyce	Nová modulární a praktická metodika syntézy 4- a 3-substituovaných fenyl-C-nukleosidů.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Byl vyvinut efektivní a praktický způsob přípravy 4- a 3-substituovaných fenyl-C-nukleosidů.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Hocek, Michal - Pohl, Radek - Klepetářová, Blanka
Číslo dokumentu (výsledku)	20
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku)v českém jazyce	Kombinovaná kvantově a molekulově mechanická studie reduktivního štěpení O ₂ v katalytickém cyklu multicopper oxidáz.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	S použitím QM/MM výpočtů byly charakterizovány klíčové intermediáty reakčního cyklu multicopper oxidáz, a byl navržen reakční cyklus.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Rulíšek, Lubomír - Solomon, E. I. - Ryde, U.
Číslo dokumentu (výsledku)	21
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku)v českém jazyce	Experimentální a teoretická studie stereoselektivity (furan-malein anhydrid) a (furan- malein imid) Diels-Alderových reakcí.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Pomocí NMR experimentů a teoretických výpočtů byly odhaleny principy řídící stereoselektivitu vybraných Diels-Alderových reakcí.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Rulíšek, Lubomír - Šebek, P. - Havlas, Zdeněk - Hrabal, R. - Čapek, P. - Svatoš, Aleš
Číslo dokumentu (výsledku)	22
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Hartree Fockovy orbitaly pro komplexní konfigurační interakci pro vysoko excitované Feshbachovy rezonance.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Zabýváme se metodou komplexně škálované konfigurační interakce pro případ vysoko excitovaných Feshbachových rezonancí, kde modelovým příkladem je rezonance 2s2 helia. Rozsáhlý výpočet metodou full-CI je redukován díky výběru konfigurací v minimálním aktivním prostoru. Porovnáváme konvergenci pro obyčejné Hartree-Fockovy (HF) orbitaly s komplexními orbitaly, které jsou získány řešením komplexně škálovaných HF rovnic. Dále porovnáváme HF orbitaly optimalizované pro základní a pro excitovaný stav helia.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Žďánská, Petra - Moiseyev, N.
Číslo dokumentu (výsledku)	23
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Studium interakce CO s aktivními centry (Cu) v zeolitech: periodický a hybridní QM/IPF přístup.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Periodický DFT a kombinovaný QM-pot přístup byl použit k popisu interakce CO s aktivními centry (Cu+) v zeolitech. CO vibrační frekvence v systému Cu+/FER byly vypočteny $\omega(\text{CO})/r(\text{CO})$ škálovací metodou, která je založena na korelaci mezi CO frekvencí (CCSD(T)) a CO vazebnou délkou (DFT) získanou na řadě modelových molekul.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Bludský, Ota - Šilhan, Martin - Nachtigall, Petr - Bucko, T. - Benco, L. - Hafner, J.
Číslo dokumentu (výsledku)	24
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Kombinovaná teoretická a experimentální studie vibrační dynamiky CO adsorbovaného na monovalentních kationtech v zeolitech.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Vibrační dynamika CO adsorbovaného na Cu+, Li+ a Na+/FER systémech byla studována kombinací experimentálních a teoretických přístupů. Výsledkem studie je formulace obecných pravidel určujících vibrační

dynamiku adsorbovaných molekul v závislosti na typu aktivního centra v zeolitech.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Bludský, Ota - Nachtigallová, Dana - Bulánek, R. - Nachtigall, Petr

Číslo dokumentu (výsledku) 25

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV)

J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v
českém jazyce

Al MAS NMR chemický posun nekoreluje s průměrnými T-O-T úhly:
teoretická studie zeolitu MCM-58.

Původní jazyk dokumentu
(výsledku)

ANG

Popis výsledku

²⁹Si and ²⁷Al NMR chemické posuny byly studovány pro materiály ITQ-4 a MCM-58. Bylo zjištěno, že z ²⁷Al NMR spekter nemůže být získána informace o distribuci mřížkového hliníku jednoduše použitím korelace mezi průměrnými T-O-T úhly a ²⁷Al NMR chemickými posuny.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Kučera, Jan - Nachtigall, Petr

Číslo dokumentu (výsledku) 26

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV)

J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v
českém jazyce

Jednoduchá korelace mezi průměrnými T-O-T úhly a Al MAS NMR
chemickým posunem neplatí ve vysokosilikátových zeolitech.

Původní jazyk dokumentu
(výsledku)

ANG

Popis výsledku

Byla studována závislost ²⁷Al NMR chemických posunů na pozici mřížkového hliníku, kompenzujícího kationtu a na stupni hydratace v zeolitu MCM-58. NMR parametry byly počítány pomocí velkých klastrových modelů (okolo 20 TO4 jednotek) v geometriích optimalizovaných pomocí periodické DFT užívající PW91 funkcionálu.

Tvůrci dokumentu (výsledku) -
příjmení a jméno

Kučera, Jan - Nachtigall, Petr - Nachtigall, Petr

Číslo dokumentu (výsledku) 27

Typ dokumentu (kód druhu
výsledku) (dle kódu RIV)

J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v
českém jazyce

Nadzvukové rychlosti, hustoty, viskozity, elektrické vodivosti, Ramanovská
spektra a simulace molekulové dynamiky vodných roztoků Mg(OAc)₂ a

Mg(NO₃)₂: Hofmeisterovy efekty a formování iontových párů.

Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Nadzvukové rychlosti, hustoty, viskozity, elektrické vodivosti, Ramanovská spektra vodných roztoků Mg(OAc) ₂ a Mg(NO ₃) ₂ byly měřeny od nízkých do vysokých koncentrací. Experimentální výsledky jsou podpořeny simulacemi molekulové dynamiky.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Wahab, A. - Mahiuddin, S. - Hefter, G. - Kunz, W. - Minofar, Babak - Jungwirth, Pavel
Číslo dokumentu (výsledku)	28
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Dvojitá substrátová a reakční specifita serinové racemasy: identifikace velmi afinního dikarboxylátového substrátu a inhibitorů a analýza beta-eliminace aktivity
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Serinová racemasa vytváří D-serin, důležitý neurotransmitter. V této práci jsme identifikovali nové inhibitory a účinný substrát tohoto enzymu.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Stříšovský, Kvido - Jirásková, Jana - Mikulová, Adriana - Rulíšek, Lubomír - Konvalinka, Jan
Číslo dokumentu (výsledku)	29
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Homologní modelování a analýza SAR analysis katepsinu D Schistosoma japonicum pomocí statinových inhibitorů ukazuje unikátní sterickou bariéru v aktivním místě důležitou pro návrh inhibitorů.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Byla připravena aspartatová proteasa ze Schistosoma japonicum a otestována s panelem specifických inhibitorů.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Caffrey, C. R. - Plachá, L. - Bařinka, Cyril - Hradilek, Martin - Dostál, Jiří - Sajid, M. - McKerrow, J. H. - Majer, P. - Konvalinka, Jan - Vondrášek, Jiří
Číslo dokumentu (výsledku)	30
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Volná hydratační Gibbsova energie bazí nukleových kyselin určená perturbací Gibbsovy energie, spojitým a hybridním přístupem.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Volná hydratační Gibbsova energie adenine, cytosinu, guanine, thyminu, uracilu a isogueninu je určená molekulovou dynamikou-thermodinamickou integrací (MD-TI) a použitím spojitého COSMO modelu a hybridního modelu. Role rozpouštědla v COSMO modelu je popsána permitivitou a v hybridním modelu je popsána kombinací permittivity a specificky vázané molekuly vody v energeticky nejvýhodnější pozici.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Fanfrlík, Jindřich - Rejnek, Jaroslav - Hanus, Michal - Hobza, Pavel
Číslo dokumentu (výsledku)	31
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Struktura a IR spektrum phenylalanyl-glycyl-glycine tripetidu v plynné fázi: IR/UV experimenty, ab initio kvantově chemické výpočty a molekulárně dynamické simulace.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Zkoumali jsme hyperplochu potenciální energie (PES) phenylalanyl-glycyl-glycine tripeptidu v plynné fázi metodami IR/UV rezonanční spektroskopie a výpočty založenými na principech kvantové chemie a statistické termodynamiky.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Řeha, David - Valdés, H. - Vondrášek, Jiří - Hobza, Pavel - Abu-Riziq, A. - Crews, B. - Vries de, M. S.
Číslo dokumentu (výsledku)	32
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Geometrie patrových a vodíkově vázaných párů bazí nukleových kyselin určených na různých úrovních DFT, MP2 a CCSD(T) až do CCSD(T)/limity kompletních básových funkcí.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Geometrie a interakční energie patrových a vodíkově vázaných dimerů uracilu a patrových komplexů adenin-thymin byly zkoumány metodami kvantově chemických výpočtů. Konkrétně standardní a o superpoziční chybu opravené optimalizace byly vypočteny metodami druhého řádu Molller-

Plesset (MP2) a spřažených klastrů s normálními dvojími a poruchovými triple excitacemi [CCSD(T)] metody v různých bázích až k limitě na nekonečnou bázi.

Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Dabkowska, I. - Jurečka, Petr - Hobza, Pavel
Číslo dokumentu (výsledku)	33
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Struktura penetabilních tekutin; Exaktní vlastnosti a srovnání simulací Monte Carlo se dvěma analytickými teoriemi
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Simulace, teoretický rozbor, nové teoretické výsledky
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Malijevský, Alexander - Santos, Andrés
Číslo dokumentu (výsledku)	34
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Polyhydroxylované safyryny; multifunkční katalyzátor aktivující hydrolyzu fosfordiesterů vody bez účasti kationtu kovu
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Syntéza ve vodě rozpustných derivátů porfyrinů
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Král, Vladimír - Lang Kamil - Králová, Jarmila - Dvořák, Michal - Martasek, Pavel - Chin, Aileen, O. Andrievsky, Andrei - Lynch, Vincent - Sessler, Jonathan, L.
Číslo dokumentu (výsledku)	35
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Molekulární soubory metalkarbonátů ve vodním prostředí; studium pomocí rozptylu světla a mikroskopie
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Agregační chování modelových struktur.
Tvůrci dokumentu (výsledku) -	Matějček, P. - Cigler, P. - Procházka, K. - Král, V.

příjmení a jméno

Číslo dokumentu (výsledku) 36

Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV) J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce Dodatkové objemy směsí homonukleárních diatomiků

Původní jazyk dokumentu (výsledku) ANG

Popis výsledku Počítačové simulace, stavové rovnice, rovnice OZ.

Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno Morávek, Pavel - Kolafa, Jiří. - Hujo, Tomáš - Labík, Stanislav

Číslo dokumentu (výsledku) 37

Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV) J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce Virialní koeficienty tuhých koulí a tuhých disků až do devátého

Původní jazyk dokumentu (výsledku) ANG

Popis výsledku Automatické programování, topologická analýza.

Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno Labík, Stanislav - Kolafa, Jiří - Malijevský, Anatol

Číslo dokumentu (výsledku) 38

Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV) J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce Gearův formalismus vždy stabilní metody prediktor-korektor v molekulové dynamice polarizovatelných molekul

Původní jazyk dokumentu (výsledku) ANG

Popis výsledku Nově navržená metoda umožňuje změnu délky kroku.

Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno Kolafa, Jiří

Číslo dokumentu (výsledku) 39

Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV) J - Článek v odborném periodiku

Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Neanalytická stavová rovnice tekutiny tuhých koulí
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Simulace, viriální koeficienty, důkaz neanalytičnosti
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Kolafa, Jiří
Číslo dokumentu (výsledku)	40
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Hustotní rozvoj radiální distribuční funkce a můstkové funkce tekutiny tuhých koulí
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Topologická analýza, diagramová analýza
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Kolafa, Jiří - Labík, Stanislav
Číslo dokumentu (výsledku)	41
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Pokovená dielektrická anténa pro terahertzové zobrazování v blízkém poli
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Ukazujeme nový přístup k mikroskopii v blízkém poli využitelný od mikrovln po terahertzovou oblast. Při experimentech na odraz jsme dosáhli prostorového rozlišení 20 mikronů v široké spektrální oblasti (což odpovídá $\lambda/200$ pro 80 GHz).
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Klein, N. - Kadlec, Filip - Kužel, Petr - Lahl, P. - Poppe, U.
Číslo dokumentu (výsledku)	42
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Nerezonanční ionizace molekul kyslíku femtosekundovými pulsy: dynamika plasmatu studovaná pomocí časově rozlišené terahertzové spektroskopie.

Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Plasma bylo vytvořeno v plynném kyslíku excitovaném fokusovanými femtosekundovými pulsy. Ukazujeme, že dominantním fotoionizačním mechanismem při excitaci u 400 nm je vícefotonová absorpce, zatímco při excitaci u 800 nm převládá generace plazmatu vlivem silného elektrického pole.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Mics, Zoltán - Kadlec, Filip - Kužel, Petr - Jungwirth, Pavel - Bradforth, S. E. - Apkarian, V. A.
Číslo dokumentu (výsledku)	43
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Terahertzová povrchová impedance epitaxních tenkých vrstev MgB ₂
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Studovali jsme povrchovou impedanci epitaxních tenkých vrstev MgB ₂ pomocí terahertzové spektroskopie. Měření kvalitativně souhlasí s výpočty pomocí modelu rozptylu na příměsích v Bornově limitě.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Jin, B. B. - Kužel, Petr - Kadlec, Filip - Dahm, T. - Pogrebnjakov, A. V. - Redwing, J. M. - Xi, X. X. - Klein, N.
Číslo dokumentu (výsledku)	44
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Terahertzová spektroskopie a její aplikace
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	cze
Popis výsledku	Ukazujeme nový přístup k mikroskopii v blízkém poli využitelný od mikrovln po terahertzovou oblast. Při experimentech na odraz jsme dosáhli prostorového rozlišení 20 mikronů v široké spektrální oblasti (což odpovídá $\lambda/200$ pro 80 GHz).
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Kužel, Petr
Číslo dokumentu (výsledku)	45
Typ dokumentu (kód druhu výsledku)	P - Patent nebo jiný výsledek typu patent

výsledku) (dle kódu RIV)	
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Sonda pro zobrazování v blízkém poli
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ger
Popis výsledku	Byla vyvinuta sonda pro zobrazování v blízkém poli využitelná v širokém frekvenčním pásmu od mikrovln po terahertzovou oblast.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Klein, N. - Kadlec, Filip - Kužel, Petr
Číslo dokumentu (výsledku)	46
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Kombinovaná teoretická a experimentální studie vibrační dynamiky CO adsorbovaného na monovalentních kationtech v zeolitech.
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Jsou zde diskutovány jednotlivé efekty ovlivňující vibrační frekvenci CO adsorbovaného na Me ⁺ iontech ve vysokosilikátových zeolitech a jsou zde definovány obecné zákonitosti určující specifickou vibraci C-O vazby v těchto karbonylech.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Bludský, Ota - Nachtigallová, Dana - Bulánek, R. - Nachtigall, Petr
Číslo dokumentu (výsledku)	47
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Charakterizace Cu ⁺ center ve FER zeolitech pomocí CO: kombinace teoretických a experimentálních TPD studií
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Site-specifická interakce CO s Cu ⁺ FER zeolitem byla studována kombinací TPD a teoretických technik. Tři různá Cu ⁺ centra byla rozlišena pomocí interakčních energií a na základě kinetických modelů byly získány populace jednotlivých center.
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	P. Nachtigall, O. Bludský, D. Nachtigallová, P. Čičmanec, H. Drobná, R. Bulánek
Číslo dokumentu (výsledku)	48

Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	D - Článek ve sborníku z akce (publikovaná přednáška – proceeding)
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	IČ studie adsorpce CO na Cu ⁺ ionty ve FER zeolitech
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	Bylo dokázáno, že vibrace C-O vazby v intrazeolitických karbonylech není citlivá na umístění iontu. Umístění iontu naopak ovlivňuje termodynamiku vzniku dikarbonylů, jež lze pomocí IČ spektroskopie sledovat
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	H. Drobná, R. Bulánek
Číslo dokumentu (výsledku)	49
Typ dokumentu (kód druhu výsledku) (dle kódu RIV)	J - Článek v odborném periodiku
Název dokumentu (výsledku) v českém jazyce	Odhalení rozdílných mechanismů aktivace enzymů CDK5/p25 a CDK2/Cyklin A
Původní jazyk dokumentu (výsledku)	ANG
Popis výsledku	V práci jsou diskutovány rozdílné vazebné vzory mezi CDK a příslušnou regulační podjednotkou a je kvantifikováno, proč vazba Cyklinu A nedostačuje k plné aktivaci enzymu CDK2, zatímco vazba p25 je dostatečná pro plnou aktivaci enzymu CDK5
Tvůrci dokumentu (výsledku) - příjmení a jméno	Otyepka, M., Bártová, I., Kříž, Z., Koča, J.
