

## **Zpráva o plnění úkolů projektu LN00A032 „Centrum komplexních molekulárních systémů a biomolekul“ za období 1.1. 2003 – 30. 6. 2003**

Během prvního pololetí 2003 nedošlo k žádným mimořádným událostem, které by ovlivnily plnění projektu. Jak vyplývá z dalšího textu, stanovené cíle byly splněny a práce probíhala podle plánu. Můžeme dokonce konstatovat, že výborné pracovní podmínky Centra nám umožnily dosáhnout několika významných výsledků s výrazným předstihem vzhledem k původnímu harmonogramu.

Za nejvýznamnější pedagogické, vědecké a popularizační úspěchy dosažené v prvním pololetí roku 2003 považujeme:

1. Úspěšně proběhla akreditace nového magisterského a doktorského studijního programu „Modelování chemických vlastností biostruktur a nanostruktur“ na PřF UK, což je první aktivita tohoto druhu v AV ČR. Oficiální zahájení tohoto programu je plánováno na druhé pololetí roku 2003. K zajištění tohoto programu vzniká Sdružení mezi ÚFCH JH a PřF UK, jehož ustavení se plánuje na druhé pololetí roku 2003 a jehož prvním vedoucím se stane řešitel projektu.
2. Publikační aktivita Centra je i nadále mimořádná; v prvním pololetí roku 2003 bylo otištěno 27 vědeckých publikací v předních světových časopisech, 17 dalších publikací je v tisku a 28 bylo zasláno do tisku. Za vědecky nejhodnotnější považujeme 2 publikace, které vyšly v celosvětově nejvýznamnějším chemickém časopise Journal of the American Chemical Society, dále byly 2 publikace zaslány do časopisu Nature a jedna do J. Mol. Biol. V časopise Vesmír vyšel v dubnu 2003 přehledný článek o chemii aerosolů od pracovníka Centra P. Jungwirtha.
3. Spolupráce mezi jednotlivými pracovišti Centra, která byla vznikem Centra iniciována, se stále prohlubuje a přináší výsledky ve formě publikací. V tomto pololetí se jedná zejména o nové vazby ÚFCH JH – VŠCHT a ÚFCH JH - FZÚ. Můžeme nyní s potěšením konstatovat, že všechna pracoviště Centra jsou již plně propojena a mají společné publikace.
3. V únoru 2003 jsme uspořádali v Praze společně s Pittsburghskou univerzitou konferenci „1st Pittsburgh-Prague symposium on Complex Molecular Systems“. Této konferenci se aktivně zúčastnilo přes 50 badatelů, včetně 25 studentů Centra. Konference byla realizována na základě mezinárodní smlouvy podepsané v tomto roce mezi ÚFCH JH a University of Pittsburgh, v rámci které již také probíhají výměnné programy pro studenty Centra.
4. Byly uděleny Wichterlovy prémie dalším třem pracovníkům Centra (J. Šponer, O. Bludský a P. Kužel), tj. v současné době v Centru pracuje 5 nositelů této prestižní ceny. Řešitel projektu obdržel v tomto roce prestižní Cenu AV ČR. Pracovník Centra P. Nachtigall získal prestižní Hertie Stiftung, v rámci kterého působí jako hostující profesor na J. W. Goethe Universität ve Frankfurtu n./M. Pracovník Centra V. Špirko se stal řádným členem Učené společnosti ČR.
5. Řešitel projektu se stal spoluřešitelem US-NSF grantu. Dále pracovník Centra P. Jungwirth je spoluřešitelem velkého projektu US-NSF v rámci programu Collaborative Research in Chemistry.
6. Byly organizovány pravidelné semináře Centra, ve kterých aktivně vystupují také studenti Centra, a to výhradně v anglickém jazyce.
7. Na půdě Centra začal pracovat postdok z Polska V. Zierkiewicz. Ukončili jsme jednání v rámci kterých v říjnu přijede jako hostující profesor S. Bradforth z University of Southern California.

8. S pracovníkem Centra P. Jungwirthem byl natočen půlhodinový program pro ČT2 „Třetí k čaji“ věnovaný problematice vědy a úniku mozků do zahraničí, který bude uveden v červenci 2003.

9. Byla připravena konference na téma fluorescenční spektroskopie, která se koná tento rok v Praze (8th International Conference on Methods and Applications of Fluorescence: Spectroscopy, Imaging and Probes, Prague, August 24-27, 2003). Jedná se o nejdůležitější fluorescenční konferenci a jejím hlavním organizátorem a předsedajícím je pracovník Centra Martin Hof.

10. V rámci popularizace vědy byla připravena kniha "Fyzikální chemie zajímavě", která za podpory Centra vyjde na podzim tohoto roku. Kniha je zaměřena na široký okruh čtenářů. Jejím cílem je vzbudit zájem o přírodní vědy u talentovaných středoškolských studentů (a jejich učitelů), vysokoškolských studentů přírodovědeckých směrů a pracovníků ve vědě a výzkumu.

#### **Nositel:**

Byly provedeny přesné výpočty stabilizačních energií planárních a patrových párů bazí nukleových kyselin a bylo provedeno jejich úspěšné srovnání s experimentem.

Pokračovalo studium mechanismu nepravé vodíkové vazby.

Pokračovalo mapování povrchů potenciální a volné energie komplexů, jakož i mikrohydratovaných komplexů

Pokračovalo studium struktury a dynamiky atmosféricky relevantním molekulových iontů na rozhraní voda/vzduch.

Byly provedeny první molekulární simulace krystalizace soli z roztoku.

Bylo modelováno zachycení reaktivních plynů (ozón, OH) na povrchu aerosolů mořské soli.

Byl navržen nový molekulární mechanismus nabíjení bouřkových mraků.

Byly provedeny molekulární výpočty k časově rozlišeným experimentům typu "optical pump-terahertz probe".

Byly studovány interakce malých molekul se systémy tranzitní kov-zeolit.

Byla vyvinuta metoda pro modelování vibrační dynamiky molekul vázaných v maticích (zeolity a matrice vzácných plynů) dovolující popis se spektroskopickou přesností ( $\sim 5 \text{ cm}^{-1}$ ).

Byla studována struktura bazí nukleových kyselin a jejich komplexů s dvojmocnými kovovými ionty pomocí spekter nukleární magnetické resonance (NMR).

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

Byla studována interakce hydratovaných dvojmocných kovových iontů skupiny zinku a hořčíku s nukleotidy.

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

Byla studována monomolekulární reorganizace při přenosu protonu ve vodíkové vazbě.

Byla dokončena analýza hydratačního obalu A formy DNA a RNA a krystalová struktura oktameru A-DNA.

Bylo vyvinuto první barvivo, které je možné excitovat diodovým laserem v modré oblasti spektra a které je současně použitelné k charakterizaci biomembrán metodou relaxace rozpouštědla.

Poprvé bylo demonstrováno použití fluorescenční korelační spektroskopie při charakterizaci micel tvořených blokovými kopolymery.

Byly nalezeny optimální podmínky pro studium kondenzace DNA pomocí fluorescenční korelační spektroskopie.

Byla vyvinuta přesná metoda k určení difúzních koeficientů a dvoudimenzionální hustoty fosfolipidů v biomembránách pomocí konfokální a dvoufotonové FCS.

Byla vytvořena a aplikována metodika pro studium spojitého spektra silně vázaných triatomických útvarů.

Byla nalezena distribuční funkce pro kvantitativní popis statistického chování „sousedících“ hladin složitých, vysoce excitovaných molekulárních útvarů.

Byla vypracována obecná metodika pro popis vibrační dynamiky molekul v termínech křivočarých souřadnic s minimalizací Coriolisovy interakce.

### **Spolunositel 1:**

V souladu s plánem prací na rok 2003 byly v prvním pololetí řešeny následující úlohy:

Studium vnitřní struktury tekutin.

Studium globálních fázových diagramů.

Nová časově reverzibilní metoda typu prediktor-korektor v molekulově dynamických simulacích systémů s polarizovatelnými molekulami.

Určování makroskopických veličin na základě *ab initio* kvantově mechanických mezimolekulárních potenciálů.

Nad rámec plánu prací na rok 2003 byla řešena následující problematika:

Výpočty termodynamických vlastností v kapalných směsích xenonu s některými alkany a cykloalkany metodou molekulární dynamiky.

Počítačové simulace směsi uhlovodíků a fluorovaných uhlovodíků na fázovém rozhraní voda-vzduch.

Simulace chemických potenciálů složek směsí.

Studium termodynamiky a vnitřní struktury směsí tekutin v pórech a na fázových rozhraních pomocí "Density functional theory" a počítačových simulací.

### **Spolunositel 2:**

Bylo zavedeno rychlé časové skenování THz signálu s akumulací dat (přeprogramování zpoždovacích drah, synchronizace s detekcí). Tím se výrazně zlepšil dynamický rozsah měření THz signálů při experimentech typu "optical pump – terahertz probe" (až na  $10^{10}$  v intenzitě signálu).

Pomocí tohoto experimentu byla proměřena sub-pikosekundová a pikosekundová dynamika solvatace chromoforů Coumarinu 153 a TBNC v různých rozpouštědlech (chloroform, izopropanol, butanol).

Probíhají analogické experimenty na systému betain / chloroform.

Vyvinuli jsme novou fázově-citlivou metodu terahertzové reflexní spektroskopie.

### **Spolunositel 3:**

Po dokončení a opublikování teoretických studií interakcí peptidů s přechodnými kovy, byly navrženy peptidové sekvence s vysokou specificitou k vybraným přechodným a předány spolupracujícím experimentálním pracovištím k testování. Tato část práce není publikována vzhledem k možnosti patentové ochrany výsledků. S předem připravenými programy pro výpočet relativistických efektů v organických biradikálech a programy byly provedeny výpočty u modelových systémů. Publikace je před dokončením.

Byly dokončeny studie UV spekter u modelu paralelních benzenů. Dvě publikace jsou v přípravě. Pro studium fotoreaktivity těchto systémů nebyl k dispozici teoretický aparát (pokusy využít stávajících metod a programů selhaly i po kvalitativní stránce), nyní se ukazuje že SAC-CI metoda by mohla být využitelná, ale jen ve spojení se 64-bitovým počítačem, který v současnosti pořizujeme z prostředků ústavu.

Byla opublikována studie interakce feromonu bombykolu s PBP enzymem (článek v prestižním *J. Mol. Biol.* byl poctěn věnovanou titulní stránkou). Vzhledem k objeveným typům interakcí se pracuje na modifikované metodice studia interakcí nepolárních systémů s proteiny vycházející z modifikovaných silových polí.

Dokončuje se studie o interakcích inhibitorů rezistentních mutant proteázy viru HIV-1, s cílem objasnit ze strukturního hlediska příčiny vzniku rezistence a navrhnout způsoby, jak mu předcházet. Výsledkem studia je poznání, že k zabránění rezistence přispívá zvýšené vazba inhibitoru k hlavnímu řetězci a snížená interakce k postraním řetězců. Mutace v těchto místech pak méně ovlivní výslednou interakci inhibitoru. Toto je vodítko k hledání dalších možných inhibitorů.

## Články za 1. pololetí roku 2003

Vyšlé:

1. Jungwirth, P.; Curtis, J. E.; Tobias, D. J.: Polarizability and aqueous solvation of sulfate dianion. *Chemical Physics Letters*, 367 (2003) 704.
2. Jungwirth, P.: Physical properties and atmospheric reactivity of aqueous sea salt micro-aerosols. in: *Water in confining geometries (Cluster Physics Series)*. Buch, V.; Devlin, J. P. (Eds.), Springer Verlag, p. 277 (2003).
3. Jungwirth P.: Aerosols and the chemistry of the atmosphere (in Czech). *Vesmír*, 82 (2003) 196.
4. Jurkiewicz, P.; Okruszek, A.; Hof, M.; Langner M.: Associating Oligonucleotides with Positively Charged Liposomes. *Cell. Mol. Biol. Lett.* 8[1] (2003) 77.
5. Benda, A.; Beneš, M.; Mareček, V.; Lhotský, A.; Hermens, W.Th.; Hof, M.: How to Determine Diffusion Coefficients in Planar Phospholipid Systems by Confocal Fluorescence Correlation Spectroscopy. *Langmuir* 19 (2003) 4120.
6. Humpolíčková, J.; Procházka, K.; Hof, M.; Tuzar, Z.; Špírková, M.: Fluorescence Correlation Spectroscopy Using Octadecylrhodamine B as a Specific Micelle-Binding Fluorescent Tag, Light Scattering and Tapping Mode Atomic Force Microscopy Studies of Amphiphilic Water-Soluble Block Copolymer Micelles. *Langmuir* 19 (2003) 4111.
7. Hof M. : Basics of Optical Spectroscopy. 'Handbook of Spectroscopy', eds. G. Gauglitz, T. Vo-Dinh, Wiley VCH Verlag, Weinheim, 39-47 (2003). ISBN 3-527-29782-0.

8. Sablinskas, V.; Steiner, G.; Hof M. : Applications of Optical Spectroscopy, 'Handbook of Spectroscopy', eds. G. Gauglitz, T. Vo-Dinh, Wiley VCH Verlag, Weinheim, 89-168 (2003). ISBN 3-527-29782-0.
9. Chocholoušová, J.; Vacek, J.; Hobza, P.: Acetic Acid Dimer in the Gas Phase, Nonpolar Solvent, Microhydrated Environment, and Dilute and Concentrated Acetic Acid: Ab Initio Quantum Chemical and Molecular Dynamics Simulations. *J. Phys. Chem. A*, 107 (2003) 3086.
10. Hobza, P.; Špirko, V.: Why is the N-1-H Stretch Vibration Frequency of Guanine Shifted upon Dimerization to the Red and the Amino N-H Stretch Vibration Frequency to the Blue? *Phys. Chem. Chem. Phys.* 5 (2003) 1290.
11. Sychrovský, V.; Schneider, B.; Hobza, P.; Židek, L.; Sklenář, V.: The Effect of Water on NMR Spin-spin Couplings in DNA: Improvement of Calculated Values by Application of two Solvent Models. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 5 (2003) 734.
12. Mrázková, E.; Hobza, P.: Hydration of Sulfo and Methyl Groups in Dimethyl Sulfoxide is Accompanied by the Formation of Red-shifted Hydrogen Bonds and Improper Blue-shifted Hydrogen Bonds: An Ab Initio Quantum Chemical Study. *J. Phys. Chem. A*, 107 (2003) 1032.
13. Špačková, N.; Cheatham, T.E.; Ryjáček, F.; Lankaš, F.; van Meervelt, L.; Hobza, P.; Šponer, J.: Molecular Dynamics Simulations and Thermodynamics Analysis of DNA-drug Complexes. Minor Groove Binding between 4',6-diamidino-2-phenylindole and DNA Duplexes in Solution. *J. Am. Chem. Soc.* 125 (2003) 1759.
14. Hanus, M.; Ryjáček, F.; Kabeláč, M.; Kubař, T.; Bogdan, T. V.; Trygubenko, S. A.; Hobza, P.: Correlated Ab Initio Study of Nucleic Acid Basis nad their Tautomers in the Gas Phase, in a Microhydrated Enviroment and in Aqueous Solution. Guanine., *J. Am. Chem. Soc.* 125 (2003) 7678.
15. Slavíček, P.; Kalus, R.; Paska, P.; Odvárková, I.; Hobza, P.; Malijevský, A.: State of the Art Correlated Ab Initio Potential Energy Curves for Heavy Rare Gas Dimers – Ar<sub>2</sub>, Kr<sub>2</sub>, Xe<sub>2</sub>, *J. Chem. Phys.* 119 (2003) 0000.
16. Cejchan, A.; Spirko, V. Transforming from Internal Coordinates to Cartesian Displacements in the Eckart Frame: a Taylor Series Expansion Approach. *Journal of Molecular Spectroscopy* 217 (2003) 142.
17. Davidová M., Nachtigallová D., Bulánek R., Nachtigall P.: Characterization of the Cu<sup>+</sup> Sites in High-silica Zeolites Interacting with CO Molecule: Combined Computational and Experimental Study. *J. Phys. Chem. B*, 107, 2327 (2003).
18. Šilhan M., Nachtigall P. Bludský O.: Theoretical investigation of the vibrational dynamics of Ag<sup>+</sup>CO solvated in the Ne matrix. *Chem. Phys. Letters*, 375, 54 (2003).
19. Rulisek, L.; Sponer, J.: Outer-shell and Inner-shell Coordination of Phosphate Group to Hydrated Metal Ions (Mg<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>+Zn<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>) in the Presence and Absence of Nucleobase. The role of Nonelectrostatic Effects. *J. Phys. Chem. B*, 107 (2003) 1913.
20. Němec, H., Kadlec, F., and Kužel, P.: Carrier dynamics in low-temperature grown GaAs studied by THz emission spectroscopy, Proceedings of 26-th International meeting on Infrared and Millimeter waves, 3-61 (2003).
21. Stanislav Labík, Hana Gabrielová, Jiří Kolafa, and Anatol Malijevský: Calculation of elementary diagrams using a Metropolis-like simulation method. *Mol. Phys.* 101, 1139 (2003).

22. Rulisek L., Havlas Z.: Theoretical studies of metal ion selectivity. 3. A theoretical design of the most specific combinations of functional groups representing amino acid side chains for the selected metal ions (Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, and Hg<sup>2+</sup>). *J. Phys. Chem. B*, 107, 2376 (2003).
23. Rulisek L., Havlas Z.: Using DFT methods for the prediction of the structure and energetics of metal-binding sites in metalloproteins. *Int. J. Quantum Chem.* 91, 504 (2003).
24. Meca L., Reha D., Havlas Z.: Racemization Barriers of 1,1'-Binaphthyl and 1,1'-Binaphthalene-2,2'-diol: A DFT Study. *J. Org. Chem.* jo034344u, web release 12.6.2003.
25. Klusak V., Havlas Z., Rulisek L., Vondrasek J., Svatos A.: Sexual Attraction in the Silkworm Moth. Nature of Binding of Bombykol in Pheromone Binding Protein-An Ab Initio Study. *Chem Biol.* 10, 331 (2003).
26. Weber J., Mesters JR., Lepšík M., Prejďová J., Švec M., Šponarová J., Mlčochová P., Stříšovský K., Uhlíková T., Souček M., Machala L., Staňková M., Vondrášek J., Klimkait T., Kraeusslich H.G., Hilgenfeld R., Konvalinka J.: Unusual binding mode of an HIV-1 protease inhibitor explains its potency against multi-drug-resistant virus strains. *J Mol Biol*, 324,739 (2002).
27. Vondrasek J., Wlodawer A.: HIVdb: a database of the structures of human immunodeficiency virus protease. *Proteins* 49, 429 (2002).

V tisku:

1. Jungwirth, P.; Gerber, R. B.; Ratner, M. A: Quantum simulations of vibrational dephasing of molecules in a cryogenic environment: HARF in an Argon Cluster. *Israel Journal of Chemistry*, in press.
2. Mucha, M.; Jungwirth, P.: Salt crystallization from an evaporating aqueous solution by molecular dynamics simulations. *Journal of Physical Chemistry B*, in press.
3. Jungwirth, P.; Buch, V.: Van der Waals attraction and coalescence of aqueous salt nanodroplets. *Collection of Czechoslovak Chemical Communication*, in press.
4. Jelínek, K.; Uhlík, F.; Limpouchová, Z.; Matějček, P.; Humpolíčková, J.; Procházka, K.; Tuzar, Z.; Špírková, M.; Hof, M. : Amphiphilic Block Copolymer Micelles with Hydrophobically Modified Shells. *Mol. Simul.*, in press (2003).
5. Humpolíčková, J.; Procházka, K.; Hof M. : Octadecylrhodamine B as a Specific Micelle-Binding Fluorescent Tag for Fluorescence Correlation Spectroscopy Studies of Amphiphilic Water-Soluble Block Copolymer Micelles. *Spectroscopic Behavior in Aqueous Media. Collect. Czech. Chem. Commun.*, in press (2003).
6. Štěpánek, M.; Humpolíčková, J.; Procházka, K.; Hof, M.; Tuzar, Z.; Špírková, M.: Light Scattering, Atomic Force Microscopy and Fluorescence Correlation Spectroscopy Studies of Polystyrene-block-poly(2-vinylpyridine)-block-poly(ethylene oxide) Micelles. *Collect. Czech. Chem. Commun.*, in press (2003).
7. Matějček, P.; Humpolíčková, J.; Procházka, K.; Tuzar, Z.; Špírková, M.; Hof, M.; Webber, S.E.: Hybrid Block Copolymer Micelles with Partly

- Hydrophobically Modified Polyelectrolyte Shells in Polar and Aqueous Media. Experimental Study Using Fluorescence Correlation Spectroscopy, Time-Resolved Fluorescence, Light Scattering and Atomic Force Microscopy. *J. Phys. Chem. A*, in press (2003).
- Ryjáček, F.; Kubař, T.; Hobza, P.: New Parametrization of the Cornell et al Empirical Force Field Covering Amino Group Nonplanarity in Nucleic Acid Bases. *J. Comp. Chem.* in press (2003).
  - Spirko, V.; Sindelka, M.; Shirsat R.N.; Leszczynski J. Bound and Continuum Vibrational States of the Bifluoride Anion. *Chemical Physics Letters*, in press (2003).
  - Sindelka, M.; Spirko, V.; Kraemer W. P. Vibrational Linestrengths for the Ground and First Excited Electronic States of  $\text{HeH}^{2+}$ . *Theoretical Chemistry Accounts*, in press (2003).
  - Civis, S.; Sebera, J.; Spirko, V.; Fiser, J.; Kraemer, W. P.; Kawaguchi, K. New Rotation-Vibration Band and Potential Energy Function of  $\text{NeH}^+$  in the Ground Electronic State. *Journal of Molecular Structure*, in press.
  - Horka, V.; Civis, S.; Spirko, V.; Kawaguchi, K. The Infrared Spectrum of CN in Its Ground Electronic State. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, in press.
  - Kučera J., Nachtigall P.: Pyrol jako testovací molekula k charakterizaci zsm-5 s ionty alkalických kovů: kombinace teoretické a experimentální studie. *Chemické listy*, in press (2003).
  - Kučera J., Nachtigall P.: Coordination of Alkali Metal Ions in ZSM-5: A Combined Quantum Mechanics/Interatomic Potential Function Study. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, in press (2003).
  - J. Genzer and Jiří Kolafa: Molecular dynamics of potential models with polarizability: comparison of methods. *J. Molec. Liquids*. (in press).
  - Orest Pizio and Alexandr Malijevský: Phase diagrams of the Lennard-Jones mixtures in a spherical cavity, *J. Molec. Liquids*. (in press).
  - Zharov I., Havlas Z., Michl J.: Ionic interactions in  $\text{CB11R12}\cdots\text{MMe}_3^+$  ( $\text{R}=\text{H, Me}$ ,  $\text{M}=\text{Si, Ge, Sn, Pb}$ ), *J. Am. Chem. Soc.*, in press (2003).

Zaslané do tisku:

- Roeselova, M.; Jungwirth, P.; Tobias, D. J.; Gerber, R. B.: Impact, trapping, and accommodation of hydroxyl radical and ozone at salt aerosol surfaces: A molecular dynamics study. *Journal of Physical Chemistry B*, submitted.
- Salvador, P.; Curtis, J. E.; Tobias, D. J.; Jungwirth, P.: Polarizability of the nitrate anion and its solvation at the air/water interface. *Physical Chemistry Chemical Physics*, submitted.
- Nahler, N. H.; Baumfalk, R.; Buck, U.; Vach, H.; Slavicek, P.; Jungwirth, P.: Photodissociation of HBr in and on Ar<sub>n</sub> clusters: The role of the position of the molecule. *Physical Chemistry Chemical Physics*, submitted.
- Slavicek, P.; Jungwirth, P.; Lewerenz, M.; Nahler, N. H.; Farnik, M.; Buck, U.: Photodissociation of HI on the surface of large argon clusters: The orientation of the librational wavefunction and the scattering from the cluster cage. *Journal of Chemical Physics*, submitted.

5. Slavicek, P.; Jungwirth, P.: Photodissociation of hydrogen halides in a cryogenic rare gas environment: A complex approach to simulations of cluster experiments. NATO ASI Series, submitted.
6. Kadlec, F.; Kadlec, C.; Kuzel, P.; Slavicek, P.; Jungwirth, P.: Optical pump-terahertz probe spectroscopy of dyes in solutions: Probing the dynamics of liquid solvent or solid precipitate? Chemical Physics Letters, submitted.
7. Mucha, M.; Jungwirth, P.: Surface tension calculations from molecular dynamics simulations: Adsorption at the gas/liquid interface. Israel Journal of Chemistry, submitted.
8. Slavicek, P.; Jungwirth, P.; Lewerenz, M.; Nahler, N. H.; Farnik, M.; Buck, U.: Pick-up simulations and photodissociation of hydrogen halides in floppy neon clusters, Journal of Physical Chemistry A, submitted.
9. Jungwirth, P.; Roesenfeld, D.; Buch, V.: A Hitherto Unrecognised Molecular Mechanism of Thundercloud Electrification. Nature, submitted.
10. Yang, X.; Fu, Y. J.; Wang, X. B.; Wang, L.S.; Slavicek, P.; Mucha, M.; Jungwirth, P.: Observation of Solvent-mediated Close Contacts of like Charges. Nature, submitted.
11. Sheynis, T.; Sýkora, J.; Benda, A.; Kolusheva, S.; Hof, M.; Jelinek R. : Peptide-lipid Interactions and Bilayer Permeation Studied in Bio-mimetic Vesicles by Fluorescence Spectroscopy. Biophys. J., submitted.
12. Kral, T.; Widerak, K.; Langner, M.; Hof, M.: Propidium iodide and PicoGreen as dyes for the DNA Fluorescence Correlation Spectroscopy measurements. Analytical Biochemistry, submitted.
13. Jurečka, P.; Hobza, P.: True Stabilisation Energies for the Optimal Planar Hydrogen Bonded and Stacked Structures of Guanine...Cytosine, Adenine...Thymin and their 9- and 1-Methyl Derivatives: Complete Basis Set Calculations at the MP2 and CCSD(T) Levels and Comparison with Experiment, J. Am. Chem. Soc., submitted.
14. Hanus, M.; Kabeláč, M.; Rejnek, J.; Ryjáček, F.; Hobza, P.: Correlated Ab Initio Study of Nucleic Acid Basis nad their Tautomers in the Gas Phase, in a Microhydrated Enviroment and in Aqueous Solution. Guanine., Phys. Chem. Chem. Phys., submitted.
15. Sponer, J.; Hobza, P.: Molecular interactions of nucleid acid bases: Quantum chemical view. Coll. Czech. Chem. Comm., submitted
16. Kučera J., Korla J., Nachtigall P., Čejka J.: Pyrrol as a probe molecule for characterization of basic sites in zeolites: a combined theoretical and experimental study. J. Phys. Chem. B., submitted.
17. Bludský O., Šilhan M., Nachtigallová D., Nachtigall P.: Calculations of site-specific CO stretching frequencies for copper carbonyls in various environments with the near spectroscopic accuracy. J. Phys. Chem. B, submitted.
18. Wu R., Nachtigall P., Brutschy B.: Structure and hydrogen bonding of 2-aminopyridine.(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> (n=1,2) studied by infrared ion depletion spectroscopy.
19. Sychrovsky, V.; Sponer, J.; Hobza, P.: Theoretical Calculation of the NMR Spin-spin Coupling Constants and the NMR Shifts Allow Distinguish between the Direct and the Water Mediated Binding of the Hydrated Divalent Cation in the Complexes Guanine...X<sup>2+</sup>, (X=Mg, Zn), J. Am. Chem. Soc., submitted.
20. Sponer, J.; Hobza, P.: Hydrogen Bonding and Stacking of DNA and RNA Bases, Coll. Czech. Chem. Comm., submitted.

21. W. Ge, B. Schneider, H.M. Berman, W.K. Olson: Knowledge-based Elastic Potentials for Docking Drugs or Proteins with Nucleic Acids. I. Quantitative Representation of DNA Base Hydration and Amino Acid Interactions. *Biphys. J.*, submitted.
22. Pashkin A., Kempa M., Němec H., Kadlec F., and Kužel P.: Phase sensitive time-domain terahertz reflection spectroscopy: A novel approach, *Rev. Sci. Instrum.*, submitted.
23. Němec H., Kužel P., Garet F., and Duvillaret L.: Characterization of one-dimensional photonic crystals by time-domain terahertz spectroscopy, *J. Opt. Soc. Am. B*, submitted.
24. Alexandr Malijevský and Anatol Malijevský: Monte Carlo simulations of thermodynamic properties of argon, krypton, and xenon in liquid and gas state using new *ab initio* pair potentials. *Mol. Phys.* (submitted).
25. G. A. Martynov, Iva Odvárková, and Anatol Malijevský: Asimptotičeskije zamykanija dja uravnenija Ornštejna-Cernike i problema fazovych perechodov, *Ž. Fiz. Chim.* (submitted).
26. Stanislav Labík and W. R. Smith: New approximate analytical formula for the solute-solvent contact distribution function in an infinitely dilute binary hard-sphere mixture. *Mol. Phys.* (submitted).
27. Brynda J., Řezáčová P., Fábry M., Hořejší M., Štouračová R., Sedláček J., Souček M., Hradílek M., Lepšík M., Konvalinka J.: A Phenylnorstatine Inhibitor Binding to HIV-1 Protease: Geometry, Protonation and Subsite-Pocket Interactions Analyzed at Atomic Resolution. *J. Mol. Biol.*, submitted
28. Lepšík M., Kříž Z., Havlas Z.: Molecular dynamics of HIV-1 protease-inhibitor complexes: factors underlying the inhibitory activity against resistant mutants. *Proteins*, submitted.

#### Personální zabezpečení

Centrum je personálně velmi dobře zabezpečeno a došlo jen k malým změnám. Od června začal v Centru pracovat postdok z Polska (Dr. W. Zierkiewicz). Od září nastoupí do Centra po návratu ze studijních pobytů v Haifě a na Harvardu Dr. P. Žďánská. Od října nastoupí v Centru více než 10 nových PhD. Studentů a několik diplomantů. V Centru také začalo pracovat několik perspektivních studentů z nižších ročníků.