

ÚOCHB AV ČR, v. v. i.

IČ: 61388963

Sídlo: Flemingovo nám. 2, 16610 Praha 6

Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2008

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 12. 6. 2009

Radou pracoviště schválena dne: 15. 5. 2009

V Praze dne 14. května 2009

I. Informace o složení orgánů veřejné výzkumné instituce a o jejich činnosti či o jejich změnách

Výchozí složení orgánů pracoviště

Pověřen vedením od: **1. 1. 2007: RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.**

Ředitel pracoviště: **RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.**

jmenován s účinností od : **1. 6. 2007**

Rada pracoviště zvolena dne 11. 1. 2007 ve složení:

předseda: **Havlas Zdeněk, RNDr., DrSc., ÚOCHB AV ČR, v.v.i.**

místopředseda: **Kraus Tomáš, Mgr., PhD., ÚOCHB AV ČR, v.v.i.**

členové:

Holý Antonín, Prof., DrSc., Dr.h.c.mult., ÚOCHB AV ČR, v.v.i.

Moravcová Jitka, Prof., CSc., VŠCHT Praha

Sychrová Hana, RNDr., DrSc., FGÚ AV ČR, v.v.i.

Hodačová Jana, Ing., PhD., VŠCHT Praha

Valterová Irena, Doc., CSc., ÚOCHB AV ČR, v.v.i.

Konvalinka Jan, Doc., CSc., ÚOCHB AV ČR, v.v.i.

Buděšínský Miloš, RNDr., CSc., ÚOCHB AV ČR, v.v.i.

Dozorčí rada jmenována dne 17. 4. 2007 ve složení:

předseda: **Rákosník Jiří, RNDr., CSc., Akademická rada AV ČR**

místopředseda: **Šaman David, Ing., CSc., ÚOCHB AV ČR, v.v.i.**

členové:

Illnerová Helena, Prof., DrSc., Vědecká rada AV ČR

Drahoš Jiří, Prof., DrSc., Akademická rada AV ČR

Chalupa Tomáš, Mgr., Městská část Praha 6

Šebek Pavel, Ing., CSc., Zentiva a.s.

Šebo Peter, Ing., CSc., ÚMG AV ČR, v.v.i.

Změny ve složení orgánů:

V průběhu roku 2008 nedošlo k žádným změnám

Informace o činnosti orgánů:

Ředitel:

V průběhu roku 2008 bylo vydáno 6 vnitřních směrnic, 14 příkazů ředitele a 8 informací vedení. Vzhledem k tomu, že dlouhodobě platné příkazy byly vydány v roce 2007, v tomto roce byly příkazy charakteru operativních nařízeních. Vnitřní směrnice upravovaly vztah s pracovníky prostřednictvím odborů (dodatky ke kolektivní smlouvě a pravidla čerpání sociálního fondu). Pravidelně se uskutečňovaly porady vedení s vedoucími vědeckých, vědecko-servisních a servisních týmů.

Jako každoročně byla vyhodnocena publikační aktivita vědeckých a vědecko-servisních týmů ústavu. S výsledky hodnocení byl seznámen celý ústav. I tentokrát došlo k výraznému nárůstu produktivity týmů v počtu a kvalitě publikací a citovanosti prací z ústavu.

Významným úkolem je příprava kompletní rekonstrukce a dostavby areálu. Příprava dokumentace pokročila do fáze schvalování dokumentace. Je předpoklad, že realizace rekonstrukce nastane nejprve u budovy C v roce 2009 a v dalším roce dojde k výstavbě budovy B v dvorním traktu. Mnoho pozornosti bylo věnováno řešení energetických nároků nově plánované technologie, otázkám využití prostor v nové výstavbě i v rekonstruovaných prostorách a hledání dočasných náhradních prostor po dobu výstavby. Laboratorní prostory v požadované velikosti se přes velké úsilí nepodařilo nalézt, jako schůdná cesta se jeví odkoupení objektu v Papírenské ulici. Ústav pořídil přístrojovou techniku v objemu 70 mil. Kč. Nejvýznamnější položky tvoří hmotnostní spektrometr LTQ ORBITRAP XL za 24 mil. Kč, analyticko-preparativní LC/MS s jednoduchým kvadrupólem za 5 mil. Kč, chromatograf GC MS s TOF analyzátořem za 6 mil. Kč a integrovaný systém pro sekvenování proteinů Emanovým odbouráváním za 6 mil. Kč.

V rámci Invited Lecture Series se uskutečnilo na ústavu 12 přednášek předních světových odborníků. Každá přednáška byla následována odbornou diskusí mezi řečníky a pracovníky ústavu. Pokračoval ústavní Postdoctoral Project, v jehož rámci pracovalo na ústavu 16 zahraničních postdoktorandů. Byl zahájen nový Sabbatical Visiting Program. Program má za cíl rozšířit kontakty pracovníků ústavu, podpořit budoucí spolupráci a propagovat práci ústavu. V rámci tohoto programu pracovali na ústavu dva význační vědci z Kanady a Rakouska.

Byly připraveny základní dokumenty pro vznik dceřiné společnosti IOCB TTO, která má za úkol poskytovat služby ústavu v oblasti komercializace duševního vlastnictví a tuto činnost organizovat. Vzhledem ke komplikovanosti této problematiky a nedostatku zkušeností v ČR byl koncept TTO vytvořen s pomocí významné poradenské firmy za dohledu Řídící komise, v níž zasedali představitelé ústavu i AV ČR. Právní dokumenty z této koncepce vzniklé byly projednávány s Radou instituce a Dozorčí radou a právními specialisty. Předpokládá se, že finální souhlas se založením IOCB TTO bude získán v první polovině roku 2009.

V oblasti komercializace výsledků ústavu bylo jednáno s řadou firem, zahraničních i domácích. Byla založena spin-off firma Okapi Sciences spolu s belgickými partnery, na které má ústav podíl. Cílem firmy jsou veterinární aplikace antivirálních látek, převážně vycházejících z patentů ústavu.

V roce 2008 byla založena grantová kancelář ústavu, která má za úkol vést evidenci ústavních grantů, kontrolovat plnění grantových povinností a pomáhat v přípravě grantových přihlášek pracovníkům ústavu.

V roce 2008 jsme uspořádali ústavní konferenci na výjezdním zasedání v Třešti. Tématem konference byly výzkumné projekty jednotlivých týmů, prezentované jejich vedoucími.

Ředitel absolvoval roční kurz „Management vědy“, pořádaný SSČ AV ČR.

Rada pracoviště:

V roce 2008 se uskutečnilo 6 jednání Rady ÚOCHB AV ČR, v.v.i.

1. zasedání – 10.1. 2008

Rada schválila a) záměr vedení uskutečnit výjezdní pracovní zasedání vědeckých pracovníků ÚOCHB v termínu 5.-7. května 2008, b) výběr tří anotovaných výsledků pro Výroční zprávu ústavu a vzala na vědomí zprávu Ing. Špičky o současném stavu a výhledu stavebních rekonstrukcí a dostavby areálu ÚOCHB.

2. zasedání – 7. 2. 2008

Rada schválila a) předložené žádosti o grantové projekty v roce 2008, b) návrh pravidel pro hodnocení vědeckých a vědecko-servisních týmů za rok 2007, c) návrh na ocenění Dr. Alexandra Wlodawera z National Cancer Institute cenou J. Heyrovského a d) 1. část Výroční zprávy ÚOCHB za rok 2007 i formulaci žádosti o roční prodloužení Výzkumného záměru.

3. zasedání – 23. 4. 2008

Rada schválila a) předběžné výsledky hospodaření a úpravy rozpočtu za rok 2007 a návrh předběžného rozpočtu na rok 2008, b) návrh aktualizace směrnice Sociální fond vč. přílohy Ceník s účinností od 1. 5. 2008 a dodatku ke Kolektivní smlouvě uzavřené dne 12. 10. 2007, který upravuje poskytování příspěvku k plné ceně hlavního jídla z provozních prostředků a ze Sociálního fondu. Dále se Rada seznámila s materiálem Systému ochrany duševního vlastnictví a předběžným odhadem finančních nároků výstavby.

4. zasedání – 19. 6. 2008

Rada schválila a) Dodatek do katalogu prací Vnitřního mzdového předpisu ÚOCHB ve smyslu doplnění třídy O12 o druh práce: vedoucí odborný pracovník grantové kanceláře a rozpočet Sociálního fondu na rok 2008 v souladu s dohodou s odborovou organizací, b) Kapitálové výdaje (oddíl X, přílohy č.1 a 2) rozpočtu ÚOCHB na rok 2008 a hospodářský výsledek roku 2007 a jeho rozdělení do fondů i návrh rozpočtu na rok 2008.

Rada projednala materiál Systému ochrany duševního vlastnictví předložený vedením a navrhla doplnit a přeformulovat Přílohu č.3 (Zveřejňování informací a patenty), zejména pak body 3, 4 a 5 dokumentu, a přeformulovat i některé pasáže Přílohy 2.2. MTA (Materials transfer agreement).

Rada diskutovala různé možnosti řešení situace 2 dočasně ustavených týmů.

V jednom případě převážil názor, že optimálním řešením je vytvoření Společné laboratoře s VŠCHT, ve druhém případě bylo doporučeno dokončení práce na centrech a grantech do období 2009-2010.

5. zasedání – 26. 9. 2008

Rada schválila a) vytvoření společného pracoviště ÚOCHB a ÚBM VŠCHT a převod pracovníků z druhého dočasného týmu do vědecko-servisního týmu, orientovaného na medicíně aplikaci steroidů, b) převedení mzdového financování vědecko-servisních týmů od 1. 1. 2009 do stejného režimu jaký existuje u vědeckých týmů, c) návrh aktualizace směrnice Sociální fond a d) účetní odpis nedobytné pohledávky za firmou Polytechna.

6. zasedání – 23. 10. 2008

V hlavním bodu programu Rada vyslechla informaci Ing. Špičky o současném stavu a výhledových plánech rekonstrukce a výstavby areálu ÚOCHB. Časový plán prací je podle současného odhadu následující: únor 2009 – dokumentace pro výběr zhotovitele, 2. kvartál 2009 – zahájení stavby: 1. etapa – novostavba budovy „B“ a rekonstrukce budovy „C“ (dokončení do konce roku 2010); 2. etapa – rekonstrukce budovy „A“ (dokončení vč. přesunů do konce roku 2013). Rada vzala na vědomí informace o stavu prací a plánech na přestavbu areálu ÚOCHB a požaduje průběžné informace o případných změnách.

Jednání per rollam

Ve dnech 3.- 8. 3. 2008 Rada ÚOCHB per rollam schválila dodatek k nájemní smlouvě na prostory pro knihovnu a sklady uzavřené s firmou Ergon, a.s.

Ve dnech 16.–21. 12. 2008 proběhlo jednání Rady ÚOCHB per rollam o těchto bodech:

Rada schválila návrh změny zřizovací listiny ústavu, která upravuje rozsah jiné činnosti ústavu.

Rada schválila prodloužení nájemní smlouvy na nebytové prostory mezi ÚOCHB jako nájemcem a ÚMG AV ČR, v.v.i. jako pronajimatelem na rok 2009 za podmínek roku 2008

Rada schválila dodatek č.3 ke Kolektivní smlouvě v důsledku změny zákona o nemocenském pojištění a úpravy ve směrnici Sociální fond.

Radou schválené důležité dokumenty jsou součástí Vnitřních směrnic ÚOCHB AV ČR, v.v.i.

Dozorčí rada:

V roce 2008 se Dozorčí rada sešla celkem na dvou zasedáních. Účast členů a nejdůležitější projednávané body podává následující rekapitulace:

Zasedání 11. března 2008

Přítomni (dle prezenční listiny v abecedním pořadí, bez titulů): Drahoš J., Chalupa T., Illnerová H., Rákosník J., Šaman D., Šebek P., Šebo P.

Omluveni: --

Hosté: Havlas Z. (ředitel ústavu), Petschová B. (zástupkyně ředitele pro věci ekonomické), Fusek M., Johnson S. (zástupci společnosti LSC), Pýcha P. (právní zástupce ÚOCHB)

Nejdůležitější projednávané body:

- Dozorčí rada posuzovala, zda forma dceřiné společnosti se zapojením soukromého sektoru je vhodnou organizační strukturou pro transfer výsledků ústavu do praxe, a zdůraznila potřebu doplňujícího posouzení právních aspektů.
- Dozorčí rada vyslovila předchozí souhlas se záměrem ústavu vložit majetek do spin-off firmy Okapi Science (Belgie) a nabýt účast v této společnosti.
- Dozorčí rada vyslovila předchozí souhlas s návrhem dodatku k nájemní smlouvě na prostory pro knihovnu a sklady uzavřené s firmou Ergon, a.s.
- Dozorčí rada vyslovila předchozí souhlas se záměrem prodloužit existující nájemní smlouvu s ÚMG AV ČR, v. v. i., o jeden rok.

Zasedání 25. června 2008

Přítomni (dle prezenční listiny v abecedním pořadí, bez titulů): Chalupa T., Rákosník J., Šebek P., Šebo P.

Omluveni: Drahoš J., Illnerová H., Šaman D.

Hosté: Havlas Z., Petschová B.

Nejdůležitější projednávané body:

- Dozorčí rada se seznámila s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření ÚOCHB za rok 2007 a přijala ji bez připomínek.
- Dozorčí rada navrhla využít situace v ÚOCHB v oblasti transferu technologií jako modelové situace i pro ostatní ústavy AV ČR a nechat zpracovat studii alternativních řešení renomovanou firmou.

Jednání per rollam

Ve dnech 15.–24. 12. 2008 proběhlo jednání Dozorčí rady per rollam o těchto bodech:

- Dozorčí rada vzala se souhlasem na vědomí návrh rozpočtu ústavu.
- Dozorčí rada udělila předchozí souhlas k prodloužení nájemní smlouvy mezi ÚOCHB AV ČR a ÚMG AV ČR, v. v. i.
- Dozorčí rada doporučila zřizovateli, aby provedl změnu zřizovací listiny, která upravuje rozsah jiné činnosti ústavu.

Ad hoc pracovní skupina ve složení J. Drahoš, Z. Havlas, J. Hrušák (Akademická rada AV ČR), M. Martáková (Právní odbor SSČ AV ČR), J. Rákosník, P. Šebek se průběžně zabývala přípravou zadání pro vypracování studie pro založení a fungování společnosti pro transfer technologií, výběrem dodavatele a posouzením závěrů vypracované studie.

II. Informace o změnách zřizovací listiny:

V roce 2008 nedošlo ke změně zřizovací listiny ústavu.

III. Hodnocení hlavní činnosti

1. Vědecká (hlavní) činnost pracoviště a uplatnění jejích výsledků

1a) stručná charakteristika vědecké (hlavní) činnosti pracoviště

Česky: Hlavní vědeckou činností ústavu je základní výzkum v oblastech organické chemie, biochemie a příbuzných disciplínách, převážně orientovaný k aplikacím v lékařství a životním prostředí. Ústav se podílí na vzdělávání studentů bakalářského, magisterského i doktorandského studia ve spolupráci s českými vysokými školami v oboru organická chemie, biochemie a mikrobiologie. Výzkum je zaměřen do šesti základních oblastí. Charakteristické výzkumné aktivity jsou pro každou oblast specifikovány níže.

Medicinální chemie – kde přináší dlouhodobě vynikající výsledky týkající se chemie a biochemie nukleových kyselin, které svým významem překračují hranice ústavu, Akademie věd i České republiky. Výzkum je cílený hlavně na vývoj léků proti virovým onemocněním, jako jsou AIDS nebo hepatitida a dále proti leukémii a jiným nádorovým onemocněním.

Biochemie a molekulární biologie – zabývá se mezioborovými projekty směřovanými ke studiu struktury a funkce životně důležitých proteinů retrovirů, patogenních kvasinek, lidských nádorových buněk, buněk podléhajících neurodegeneraci. Dále se věnuje struktuře a aktivitě peptidů a jejich analogů. Výzkum v oboru zemědělské biotechnologie se zabývá studiem role enzymů a inhibitorů v ochraně rostlin před škodlivým hmyzem.

Organická syntéza – zabývá se obecnými principy přípravy látek, syntézou tzv. funkčních molekul s vlastnostmi vhodnými pro tvorbu nanomateriálů a materiálů pro molekulovou elektroniku a samoskladbu.

Chemie přírodních látek – věnuje se chemické komunikaci hmyzu a její molekulární podstatě. Zabývá se především feromony a jejich následným využitím v praxi při hubení škůdců. Dále je zaměřena na výzkum peptidů s antibakteriální aktivitou.

Fyzikální chemie – využívá fyzikálních metod pro určování struktur organických látek, studuje vztahy mezi strukturou a fyzikálními vlastnostmi. Pozornost je zaměřena i na určování fyzikálních vlastností biologicky významných molekul.

Výpočetní chemie – zabývá se aplikací kvantové chemie a molekulárních simulací na předpovědi struktury, reaktivity a vlastností organických molekul a biomolekul.

Anglicky: The Institute carries out research in organic chemistry, biochemistry and related disciplines with a particular focusing on medical and environmental applications. It educates undergraduate, graduate, and PhD students in the field of organic chemistry, biochemistry, and microbiology in cooperation with Czech Universities. The main research areas are listed below.

Medicinal Chemistry – provides excellent long-term results in the chemistry and biochemistry of nucleic acids, the importance of which exceeds the boundaries of both the IOCB and the Academy of Sciences. Research focuses on the development of pharmaceuticals against viral diseases such as AIDS and hepatitis as well as against leukemia and other cancers.

Biochemistry and Molecular Biology – focus on interdisciplinary projects oriented towards the study of the structure and function of proteins of retroviruses, pathogenic yeasts, human cancer cells, neurodegenerative cells, and structure and activity of peptides and their analogs. The research in the field of agriculture biotechnology is focused on analysis of a role of enzymes and inhibitors in protection of plants against insect.

Organic Synthesis – deals with general principles of preparation of substances, synthesis of functional molecules with properties suitable for the preparation of nano-materials and materials for molecular electronics and self-assembly.

Chemistry of Natural Products – deals with chemical communication and its molecular bases. It is focused namely on pheromones and other semiochemicals with subsequent utilization for pest control. Peptides with antibacterial activity are also studied.

Physical Chemistry – performs organic and bioorganic structure determination by physical methods and studies the relationship between structure and physical properties.

Computational Chemistry – uses quantum chemistry and molecular simulation to forecast the structure, reactivity, and properties of organic and bioorganic molecules.

1b) výčet nejdůležitějších výsledků vědecké (hlavní) činnosti a jejich aplikací

Výsledky vědeckých aktivit ústavu v roce 2008 shrnuje 277 publikací v mezinárodních impaktovaných časopisech, 29 publikací v (dosud) neimpaktovaných časopisech, 4 kapitoly v knižních publikacích, 211 konferenčních příspěvků a 4 patentové přihlášky. K nejvýznamnějším výsledkům patří:

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výstupu
1	Formální totální syntéza estronu	11
2	Vývoj obecné metodiky syntéz tri- a tetrasubstituovaných purinů kombinací cross-coupling and C-H aktivačních reakcí	6
3	Elektrochemické značení DNA pomocí amino- a nitrofenylových zbaček a využití v minisekvencích DNA	4
4	Vývoj metodiky syntéz purinových nukleosidů nesoucích funkcionalizované substituenty v poloze 6 a jejich cytostatická aktivita	1, 16-18, 26
5	Vývoj modulární metodiky syntéz C-nukleosidů a jejich aplikace v chemické biologii	2, 9, 15, 27
6	Nové organokatalyzátory založené na axiálně chirálních pyridin-N-oxidech	13, 19, 20
7	Značení nukleosidů komplexy Ru(bpy) ₃	29
8	Analogy insulinu s modifikacemi v poloze B26: Divergence vazebné afinity a biologické aktivity.	30
9	Porovnání buněčných kultur epitelových buněk získaných z metastazujících a nemetastazujících nádorů prsu pomocí dvojrozměrné elektroforetické analýzy	31
10	Synergistický efekt CART peptidu a cholecystokininu na regulaci příjmu potravy u normální myši	32
11	Lidská N ⁶ -methyl-AMP-aminohydrolasa aktivuje profarmaka N ⁶ -substituovaných acyklických nukleosidfosfonátů, potenciálních antivirotik a antileukemických agens.	33
12	Alfa anomer 5-aza-2'-deoxycytidinu (5azadCyd) účinně potlačuje expresi telomerasy v leukemických buňkách HL-60. Účinky 5azadCyd na expresi enzymu byly srovnány s vybranými inhibitory methylace DNA včetně decitabinu a odpovídají jeho hypomethylační aktivitě. Potlačení exprese enzymu (<i>hTERT</i> down regulation) koreluje s antiproliferační aktivitou studovaných látek.	34
13	1-(S)-[3-Hydroxy-2-(fosfonomethoxy)propyl]-5-azacytosin představuje nový, perspektivní acyklický nukleosidfosfonát s protivirovou účinností vůči DNA virům. Bylo zjištěno, že cílovým metabolitem je dlouhodobě intracelulárně stabilní HPMP-5azC difosfát.	35
14	Byla vypracována podrobná studie chemické stability nového virostatika 1-(S)-[3-hydroxy-2-(fosfonomethoxy)propyl]-5-azacytosinu (HPMP-5-azaC) s využitím NMR spektroskopie	36
15	Byla provedena syntéza N-3 substituovaných acyklických nukleosidfosfonátů jako potenciálních inhibitorů thymidinfosforylasy	37
16	Enzymatickou cestou byla provedena polymerizace několika již dříve připravených fosfonomethylderivátů 2-deoxynukleosidů. Oligomery takto získané by byly chemickou syntézou dostupné jen velmi obtížně.	38
17	Byla syntetizována nová karbocyklická analoga nukleosidů účinná proti Coxsackie virům.	39,40,41
18	Byla vypracována metodika přípravy stabilních acyklických analogů uridindifosfátu a trifosfátu jako potenciálních inhibitorů deoxyuridin-5'-trifosfátnukleotidohydrolasy (dUTPasy).	42

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výstupu
19	Byla dokončena syntéza pyrimidinových bisfosfonátů typu „s otevřeným kruhem“ a studie jejich komplexace s biologicky relevantními kovovými ionty.	43
20	Byla objevena možnost transdermální aplikace PMEAs s využitím permeačního akceleračního DDAK (dodecyl-6-dimethylamino-hexanoát), který netoxický, plně biodegradabilní a urychluje až 179-krát průnik PMEAs přes kůži.	44,45
21	Je popsána syntéza nového typu linkeru s kyanoethylskupinou připojeného k polymernímu nosiči, který je vhodný k syntéze oligodeoxynukleotidů s terminální fosfoesterovou skupinou.	48
22	Byly připraveny nové izosterní analogy 3'-nukleotidů, alfa-L- a beta-L-prolinol nukleosid 3'-N-methylfosfonových kyselin postrádající stereogenní centrum v poloze 3' prolinolového kruhu.	49
23	Nový přístup založený na jednoduchých a dvojitých diferenčních Ramanových spektrech dovoluje extrahovat a analyzovat spektroskopické signatury způsobené chemickou modifikací v místě mismatch páru v duplexech nukleových kyselin.	50
24	D-typ retrovirů, jehož zástupcem je M-PMV, skládá nezralé virové částice v cytoplasmě infikované buňky. Byl identifikován buněčný protein Tctex-1-součást dyneinového motoru, který se podílí na transportu retrovirových polyproteinů na místo skládání v hostitelských buňkách. Tctex-1 specificky interaguje s M-PMV matrixovým proteinem. Mutace R55F v matrixovém proteinu (MA) změnila místo skládání z cytoplasmy na cytoplasmatickou membránu. Porovnáním NMR struktur MA wt a R55F mutantu byla identifikována strukturní změna, zabráňující vazbě Tctex-1 k R55F MA.	53
25	Byl naklonován gen kódující delta9 desaturasu ze samičky čmeláka <i>Bombus lucorum</i> pomocí cDNA získané z RNA feromonové žlázy a tukového tělesa. Tato desaturasa upřednostňuje osmnáctiuhlíkovou nasycenou mastnou kyselinu jako substrát. Výsledky z experimentů s inkubací izolované labiální žlázy s prekursory feromonů a jejich přímých nástřiků do těla čmeláka potvrdily, že esterifikace feromonů probíhá přímo v labiální žláze.	52
26	Retrovirový kapsidový protein (CA) zprostředkovává interakce vedoucí ke skládání jak nezralé, tak zralé virové částice. Pro studium role Pro1 a s ním interagujících Asp zbytků v CA M-PMV při skládání zralého core, byly do sekvence CA zavedeny bodové mutace P1A, P1Y, D50A, T54A a D57A. Mutace P1A a D57A blokovaly štěpení polyproteinu Gag, virové částice měly poškozený core a byly neinfekční. Tato data naznačují, že oblast CA, zahrnující Asp50-Asp57 hraje důležitou roli ve stabilizaci β -smyčky při tvorbě zralé virové částice.	54
27	Molekulární charakterizace nového typu antivirové rezistence u HIV pozitivních pacientů	61
28	Karborany jako účinné a specifické inhibitory překonávající antivirovou resistenci u HIV	62
29	Souhrnný článek obsahující současné informace o sekretovaných proteasách a lipasách z <i>Candida albicans</i>	55
30	Byl identifikován protein CR3-RP (protein podobný CR3 adhezivnímu receptoru) u <i>C. albicans</i> . Blokování tohoto proteinu polyklonálními protilátkami snížilo schopnost <i>C. albicans</i> adherovat k buňkám epitelu a ovlivnilo tvorbu a tloušťku biofilmu, pozorovanou skenovacím konfokálním mikroskopem. Tyto výsledky ukazují, že CR3-RP by mohl sloužit pro vývoj vakcíny.	56
31	Při řešení 3D struktury N-terminální domény kapsidového proteinu z Mason-Pfizerova opičího viru pomocí NMR byly přiřazeny 1H, 13C, a 15N resonance hlavní páteře a postranních řetězců proteinu.	51
32	Klíště <i>Ixodes ricinus</i> je přenašečem klíštěvé encefalitidy a lymfské boreliózy. Identifikovali jsme trávicí proteasy nezbytné pro	69

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výstupu
	metabolismus klíštěte jako nové perspektivní antigeny pro vývoj vakcíny proti klíšťatům.	
33	Brassinosteroidy, syntéza a aktivita některých fluoroanalog.	70,71
34	Aktivity steroidních sulfatáz a sulfuryl transferáz v nádorech lidského mozku	76
35	Analoga cholesterolu s fluorescenční značkou	75
36	Selektivita redukcí 7-ketosteroidů borohydridem sodným	74
37	Nový způsob přípravy a studium vlastností helikálně chirálních heterocyklů - azahelicenů	77, 84
38	Objasnění původu helicity a jejího řízení při syntéze helikálně chirálních aromátů	78, 85
39	Syntéza cyklodextrinových duplexů a studium jejich komplexačních schopností	79
40	Pozorování vzniku a zániku bublin v molekulárních klecích	80
41	Koordinační silami řízené orientované self-assembly trigonálních prizmat. Konformační chiralita.	81
42	Helquaty: snadná, modulární a robustní syntéza nových helikálních dikationtů	82
43	Nukleofilní difluoromethylace a difluoromethylenace aldehydů a ketonů pomocí diethyl difluoromethylfosfonátu.	87
44	Rozpustnost etherů v perfluorovaných uhlovodících. Experimentální a teoretická studie.	88
45	Obecná a účinná metoda nekatalyzované přípravy trialkylsilyl derivátů kyanohydrinů z ketonů.	89
46	V jedu kleptoparasitické včely <i>Melecta albifons</i> jsme objevili nový peptid s vysokou antimikrobiální aktivitou a nazvali ho melectin. Měřením jeho struktury metodou cirkulárního dichroismu jsme zjistili, že peptid může zaujmout α -helikální amphipathickou sekundární strukturu v anisotropním prostředí bakteriální membrány. Melectin je vhodnou strukturou pro vývoj nových účinných peptidových antibiotik.	90
47	Pomocí metody syntézy peptidů na pevné fázi jsme připravili 40 analogů peptidů nalezených v jedu vos podčeledi Polistinae. Tyto peptidy včetně některých analogů byly aktivní v testech proti Gram-pozitivním i Gram-negativním bakteriím. Některé z nich mají nízkou toxicitu vůči eukaryotním buňkám.	91
48	Dynamika produkce samčích i samičích sexuálních feromonů čmeláka zemního v průběhu jejich života.	92,93
49	Charakterizace delta9-desaturasy, jednoho z enzymů feromonální žlázy samců čmeláka hájového.	94
50	Nalezení anomální 26:2 mastné kyseliny u samců čmeláka lučního a její role v biosyntéze feromonu.	95
51	Biologický důkaz role <i>E,E</i> -farnesenu jakožto poplašného feromonu u termitů <i>Proterhinotermes canalifrons</i> a studium chování těchto termitů.	96,97
52	Studium aktivity lipolytických enzymů za podmínek superkritické extrakce.	98,99
53	Chemie a biologie isoprostanů	104
54	Ovlivnění aktivity enzymu RuBisCO působením oxysterolů	110, 114, 115
55	Příprava geneticky modifikovaných rostlin exprimujících geny pro vazbu těžkých kovů nebo biotransformační enzymy.	108, 109,

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výstupu
		113
56	Byly vyvinuty nové interpretační metody pro určování struktury molekul z optických spekter	116,117, 118
57	Valenční vibrace C-O vazby jako nezvykle velký spektrální marker pro přenos elektronu mezi mědí (II) a fenolátovým aniontem	121
58	Syntéza plynných karbenů vzácných plynů ArCH ₂ ⁺ v plynné fázi s využitím dvojnásobně ionizovaného bromomethanu jakožto superelektrofilního reakčního činidla	122
59	Dynamická struktura domeru benzénu byla studována pomocí „on-the-fly“ molekulové dynamiky založené na DFT-D metodě, která zahrnuje disperzní energii. Dynamický popis je důležitý u teplot vyšších než 10 K, kde interkonverze mezi T-strukturou a paralelně posunutou strukturou je možná a obě struktury koexistují. Analýza T-struktur ukázala, že symetrická C _{2v} struktura prakticky není populována a C _s struktura je dominantní. Tento závěr plně souhlasí s IČ experimenty.	123
60	Přehledný článek shrnuje nedávné pokroky v kvantově-chemických výpočtech patrových interakcí v nukleových kyselinách. Detailně je vysvětlen velmi komplexní vztah mezi výpočty patrových interakcí v plynné fázi, jak je určen kvantově-chemickými výpočty, a vysoce variabilní úlohou těchto interakcí v nukleových kyselinách. Jsou také shrnuty nedávné výpočty patrových interakcí bazí nukleových kyselin včetně podrobné analýzy stackingu v B-DNA.	124
61	Byla provedena kvantově-mechanická studie povahy interakcí mezi bázemi nukleových kyselin v jejich excitovaných stavech. Byly analyzovány příspěvky dipólých interakcí krátkého dosahu v závislosti na typu elektronického přechodu a vzájemné orientace bází nukleových kyselin. Získané výsledky přispějí k porozumění přenosu excitační energie a tvorby excimerů v DNA struktuře.	125
62	Vysvětlení molekulového mechanismu precipitace lysozymu a objasnění Hofmeisterovy čady iontů pomocí molekulových simulací.	126,127, 128
63	Záskání ionizačních potenciálů pyrimidinových bazí DNA ve vodném prostředí.	129
64	Molekulární design peptidů selektivně vázajících vybrané ionty kovů z fragmentů proteinových struktur	135
65	Studium a popis reakčního mechanismu štěpení HDV ribozymů pomocí QM/MM metod	131
66	Studium interakce karboranů a nepeptidových inhibitorů s HIV-1 proteasou. Srovnání teoretických výpočtů s experimenty	132,133, 134
67	Teoretický popis elektronové struktury komplexů ruthenia a osmia a jejího vlivu na redukční potenciály těchto komplexů	140,141
68	Vyhodnocení Intramolekulární superpoziční chyby v kvantově-chemických výpočtech větších molekul	143
69	Vysvětlení mechanismu asymetrické allylace aldehydů katalyzované chirálními isochinolinovými N-oxidy	137
70	Byla vyvinuta nová kapilárně elektroforetická metoda, která umožnila stanovit acidobazické disociační konstanty (konstanty acidity, pK _a) ionogenních skupin azahelicenů v methanolu a ve vodě. Hodnoty pK _a pyridiniových skupin studovaných monobazických 1-aza- a 2-aza[6]helicenů a dibazického 1,14-diaza[5]-helicenu byly stanoveny nelineární regresní analýzou závislosti efektivních elektroforetických pohyblivostí těchto sloučenin na pH změřených kapilární zónovou elektroforézou prováděnou v zařízení vlastní konstrukce s křemennou kapilárou a UV-fotometrickou detekcí při 206 nm. Hodnoty pK _a představují významné fyzikálně-chemické parametry azahelicenů, které kvantitativně charakterizují jejich acidobazické vlastnosti.	144,145

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výstupu
71	Kapilární elektroforéza s nosnými amfolyty jakožto základními elektrolyty (CABCE) byla vyvinuta jako vhodná alternativa ke kapilární zónové elektroforéze (CZE) s klasickými pufovanými základními elektrolyty pro separaci homologní série hmyzích oostatických peptidů, diastereomerů fosfinátových pseudopeptidů a peptidů uvolňujících gonadotropiny. Selektivita obou metod pro dané směsi peptidů byla shodná, avšak separační účinnost CABCE pro diastereomery fosfinátových pseudopeptidů byla ve srovnání s klasickou CZE vyšší.	146,147
72	Byla vyřešena trojrozměrná struktura transkripčního represoru CggR z bakterie Bacillus subtilis. Na základě struktury a biochemické charakterizace byly identifikovány dříve neznámé ligandy a efekty tohoto represoru.	151
73	Kvaziplanarita peptidové vazby způsobená nízkou ležícími vibracemi	152
74	Studium vybraných organických molekul, jejich struktur a reakcí	153,154
75	Nová metoda pro výpočet tranzitních maticových prvků	155
76	Vypracování efektivní krokové syntézy dosud jen obtížně dostupných oligosacharidů D-mannosaminového typu	156
77	Modelová DNA vakcinace genovou vakcinou konstruovanou na bázi polykationických liposomů	157
78	Přehledné články mající vztah k předmětu výzkumné činnosti týmu	158-161
79	Patentová ochrana výsledků dosažených v oblasti výzkumu nepyrogenních glykopeptidových, tj. nové skupiny bezpečných a strukturně definovaných imunoterapeutik. Aplikačními oblastmi jsou: (a) adjuvans pro přípravu vakcín nové generace (rekombinantních a genetických), (b) stimulace vrozené protiinfekční a protinádorové imunity, (c) úprava haemopoiesy poškozené radio- popř. chemoterapií. Tyto výsledky jsou předmětem tento rok podané UK patentové přihlášky, připravené PCT přihlášky a zakládané „spin-off firmy“ (Mendel Therapeutic s.r.o.)	162

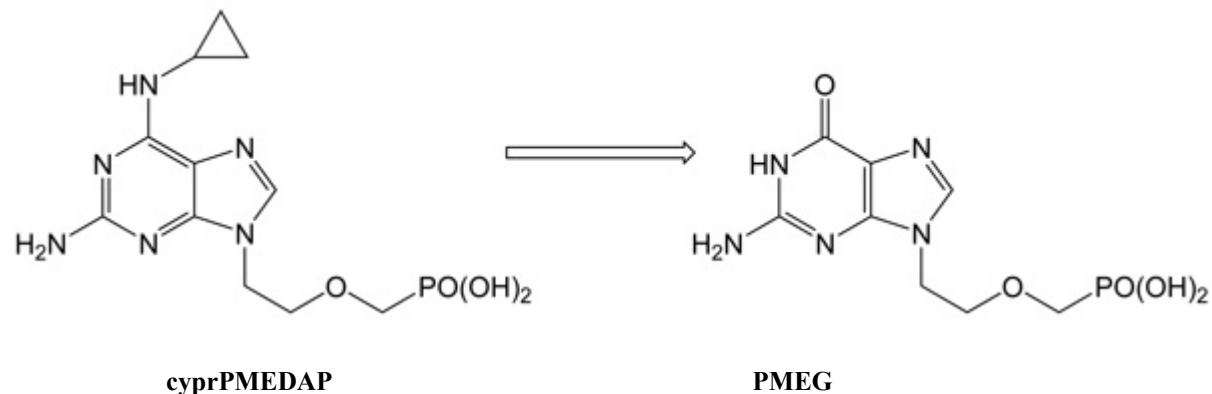
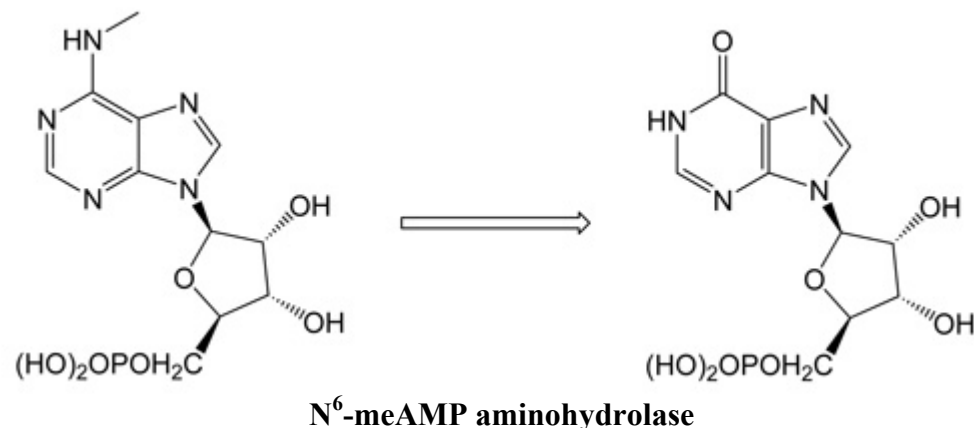
1c) anotace vybraných výsledků z bodu 1b)

Pořadové číslo anotace: 1

N^6 -Methyl-AMP-aminohydrolasa – klíčový enzym intracelulární aktivace N^6 -substituovaných purinových acyklických nukleosidfosfonátů

Doposud nepopsaný enzym katalysuje aminohydrolysu přirozených substrátů N^6 -meAMP, N^6,N^6 -dimethyl-AMP and N^6 -medAMP na IMP nebo dIMP Kromě své přirozené metabolické funkce, N^6 -methyl-AMP-aminohydrolasa aktivuje profarmaka N^6 -substituovaných

acyklických nukleosidfosfonátů, potenciálních antivirotik a antileukemických agens. Příkladem je deaminace N^6 -cyklopropyl-2,6-diamino-9-[2-(fosfonomethoxy)ethyl]purinu (cyprPMEDAP), intracelulárního metabolitu antileukemické látky GS-9219 na aktivní nukleotidový analog 9-[2-(fosfonomethoxy)ethyl]guanin (PMEG).



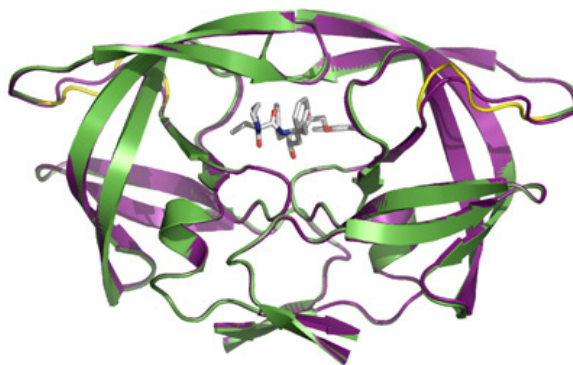
Citace výstupu: Schinkmanová M., Votruba I., Shibata R., Han B., Liu X., Cihlář T., Holý A. (2008) Human N^6 -Methyl-AMP/dAMP aminohydrolase (abacavir 5'-monophosphate deaminase) is capable of metabolizing N^6 -substituted purine acyclic nucleoside phosphonates. Collect. Czech. Chem. Commun. Roč. 73, č. 2 (2008) 275-291.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ivan Votruba, 220183209, votruba@uochb.cas.cz

Pořadové číslo anotace: 2

Molekulární charakterizace nového typu antivirové resistance u HIV pozitivních pacientů

Inhibitory virové proteasy jsou často a úspěšně užívanými léky proti AIDS. Významnou komplikací úspěšné léčby je vývoj virové resistance. Pod selekčním tlakem inhibitorů se totiž velmi rychle objevují virové mutanty, které vůči příslušným látkám už nejsou citlivé. Většina mutací v HIV protease, které vedou k vývoji resistance, spočívá v záměně jedné nebo více aminokyselin v okolí vazebného místa pro inhibitor. Nedávno však byly popsány mutace zcela nového typu, spočívající v inserci (vlození) jedné nebo více aminokyselin do sekvence virové proteasy. Žádný takový enzym však dosud nebyl naklonován a ani nebyla charakterisována resistance nebo její mechanismus na molekulové úrovni. Ve spolupráci s kolegy z Universitního lékařského centra v Utrechtu jsme naklonovali dvě proteasy obsahující aminokyselinové inserce, pocházející z holandského pacienta dlouhodobě léčeného inhibitory virové proteasy. Tyto enzymy jsme připravili rekombinantní expresí v *E.coli*, plně jsme je enzymologicky charakterisovali, spolu se skupinou Pavlína Řezáčové jsme vyřešili jejich strukturu rentgenovou difrakcí a navrhli mechanismus, jakým aminokyselinové inserce mohou způsobit vznik resistance proti inhibitorům proteasy u HIV. Jedná se o první práci tohoto druhu v literatuře.



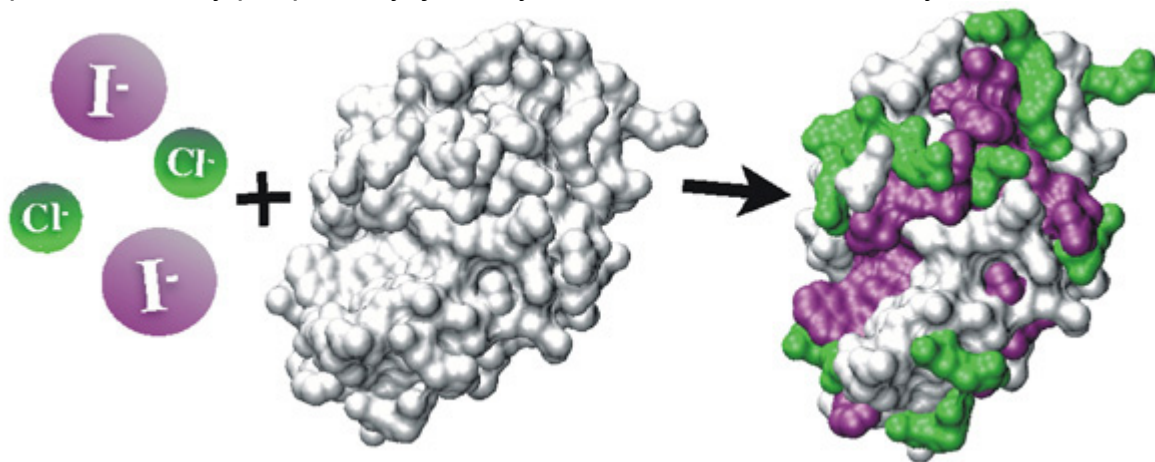
Citace výstupu: Kožíšek, M. - Grantz Šašková, K. - Řezáčová, P. - Brynda, J. - Maarseveen van, N. M. - De Jongh, D. - Boucher, Ch. A. B. - Kagan, R. M. - Nijhuis, M. - Konvalinka, J.: Ninety-nine is not enough: molecular characterization of inhibitor-resistant human immunodeficiency virus type 1 protease mutants with insertions in the flap region. *Journal of Virology*. Roč. 82, č. 12 (2008), s. 5869-5878.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Jan Konvalinka, 220183218, konval@uochb.cas.cz

Pořadové číslo anotace: 3

Asociace proteinů v solných roztocích: Molekulární porozumění Hofmeisterově řadě

120 let poté, co Franz Hofmeister (na Farmakologickém ústavu v Praze) seřadil ionty solí podle jejich schopnosti vysolovat bílkoviny, současné simulace molekulové dynamiky poskytují klíč k porozumění lyotropní (Hofmeisterovy) řady na molekulové úrovni. Pomocí simulací interakcí mezi proteiny ve vodných roztocích alkalických halidů jsme ukázali, že řazení iontů ovlivňuje ne jeden, ale řada různých efektů. Ve skutečnosti jsme pro modelový případ asociace molekul lyozymu jasně pozorovali přinejmenším dva takové efekty. Jde o přímou interakci mezi vodnými anionty s pozitivně nabitými postranními řetězci aminokyselin a afinita těchto iontů k hydrofóbním částem povrchu bílkoviny. Zatímco první interakce jsou silnější pro chlorid než pro iodid, opak je pravdou pro druhý efekt. Pro studovaný případ hydrofóbní efekt iodidu vyhrává nad iontovým párováním chloridu, což vede k silnější asociaci molekul lyozymu ve vodném roztoku NaI než NaCl. Tyto výsledky, podporované experimenty, mají důsledky nejen pro precipitaci proteinů, ale také pro další iontově specifické efekty pro proteiny, jako krystalizace, denaturace a enzymatická aktivita.



Citace výstupu: Lund, M. - Vrbka, L. - Jungwirth, P.: Specific ion binding to nonpolar surface patches of proteins. *Journal of the American Chemical Society*. Roč. 130, č. 35 (2008), s. 11582-11583; Lund, M. - Jungwirth, P. - Woodward, C. E.: Ion specific protein assembly and hydrophobic surface forces. *Physical Review Letters*. Roč. 100, - (2008), , 258105-1-258105-4; Lund, M. - Vácha, R. - Jungwirth, P.: Specific ion binding to macromolecules: Effects of hydrophobicity and ion pairing. *Langmuir*. Roč. 24, č. 7 (2008), s. 3387-3391.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Pavel Jungwirth, 220410314, jungwirth@uochb.cas.cz

1d) nejvýznamnější popularizační aktivity pracoviště

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Pořádající instituce	6 Datum a místo konání
1	Rozhovor v Hospodářských novinách SK	Rozhovor s prof. Antonínem Holým v Hospodářských novinách SK	ÚOCHB + HN SK	
2	Článek v týdeníku Respekt	Článek – „ V Petriho misce“	UOCHB + Respekt	11.8.2008
3	Reportáž v ČT	Reportáž – „ Testování nového léku „	ÚOCHB + ČT	11.8.2008
4	Rozhovor v Magazínu Právo	Rozhovor/článek – prof. Antonín Holý, Dr. Zdeněk Havlas	ÚOCHB +Magazín Právo	30.8.2008
5	Rozhovor v ČT24 (Studio 6)	Rozhovor se zástupci UOCHB a University of Manchester	ÚOCHB + ČT	29.9.2008
6	Reportáž na ČT1 (168 hodin)	Reportáž o vývoji nových léku prof. Antonína Holého	ÚOCHB + ČT	5.10.2008
7	Vyhlášení vítězů soutěže Česká hlava	http://www.rozhlas.cz/mozaika/veda/_zprava/516490	Český rozhlas, Vltava	19.11.2008
8	Interview na ČT24	http://www.ceskatelevize.cz/vysilani/21.11.2008/208411058041121-01:05-24-interview-ct24-pavel-hobza-vedec-ustav-organicke-chemie-a-biochemie-av-cr.html	ČT	21.11.2008
9	Rozhovor pro televizi Z1	http://www.z1tv.cz/a.html?auuid=dc8c88fb-bf60-4a81-aaff-f9f565d210ef		18.11.2008
10	Medailon v ČT1	Rozhovor s prof. Pavlem Hobzou k udělení ceny Česká hlava	ÚOCHB + ČT	18.11.2008
11	Rozhovor v Mf Dnes	Rozhovor s prof. Pavlem Hobzou	ÚOCHB + Mf Dnes	22.11.2008
12	Podzimní škola pro	Cyklus přednášek + 1 denní praktika	ÚOCHB +	26.-31.10.2008

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Pořádající instituce	6 Datum a místo konání
	středoškolské učitele chemie a biologie 2008		CSBMB	
13	Návštěva evropského komisaře pro vědu a výzkum (Janez Potočnik)	Představení ústavu a exkurze po pracovištích ústavu	ÚOCHB + zastoupení Evropské komise v Praze	6.11.2008
14	Den otevřených dveří	Exkurze s výkladem pro školy a veřejnost, celkem 369 návštěvníků	AV ČR + ÚOCHB	6.-8.11.2008
15	Článek v Lidových novinách	„Vědce zaujala epidemie obezity“. Lidové noviny, 14.6.2008, s. 27. Autorky: Lenka Maletínská a Jana Maixnerová	Lidové noviny	14.6.2008
16	Článek ve Vesmíru	„Epidemie obezity a regulace příjmu potravy“, Vesmír 87 (6), s. 410-412, Autoři: Petr Sucharda, Martin Fried, Jana Maixnerová, Lenka Maletínská, Resha Matyšková	Časopis Vesmír	Červen 2006
17	Seriál TV Nova VIZITA	Účast na připravovaném projektu TV NOVA zaměřeném na popularizaci vědy a jejich výsledků (seriál VIZITA – účast na dílu o AIDS a HIV).	TV NOVA	Natáčení pořadu na ÚOCHB 10.12. 2008
18	Přednáška pro občany města Broumov	Přednáška o vývoji antivirotik na pozvání Nadace města Broumov pro občany		27. 3. 2008, Broumov
19	Přednáška pro studenty Gymnázia	Přednáška o vývoji antivirotik pro studenty Gymnázia Broumov		27. 3. 2008
20	Přednáška pro studenty ZDŠ Broumov	Přednáška o vývoji antivirotik pro studenty ZDŠ Broumov		28. 3. 2008
21	ČT 24, pořad Rendez vous	3 díly pořadu ČT 24 o osobnostech české vědy, moderuje Jan Konvalinka (hosté L. Machala, J. Hruška, P. Jungwirth)	ČT24	
22	Článek o Učené	Článek o Učené společnosti ČR v časopise Národní 3	AV ČR	

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Pořádající instituce	6 Datum a místo konání
	společnosti ČR v časopise Národní 3			
23	Účast v pořadu ČT „Krásné ztráty“	Účast v pořadu ČT „Krásné ztráty“ (Jan Konvalinka, spolu s Vl. Michálkem)	ČT	
24	Článek v MF Dnes	Bezpečnost pacientů v českých nemocnicích a novinářská etika (J. Konvalinka, P. Klener, H. Illnerová a další)	MFDnes, červen 2008	
25	Publikum	Přednáška o neurosteroidech	VŠCHT	27.2.2008, VŠCHT Praha
26	Seminář	Přednáška o biologicky aktivních a zajímavých steroidech z rostlin	PřF UK	11.11.2008 PřF Praha
27	Zvaná přednáška	Přednáška	Department of Molecular and Biomolecular engineering, North Carolina State university, Raleigh, USA	19. březen 2008, Raleigh, USA
28	Zvaná přednáška	Přednáška	Department of Chemistry, Universidad Autonoma de Madrid, Spain	31. listopad, 2008 Madrid, Spain
29	Přípravný kurs na chemickou olympiádu pro středoškolské studenty	Série přednášek z organické chemie	Národní institut dětí a mládeže	3.-7.3.2008, Konferenční centrum VŠCHT, kolej Sázava
30	Týden vědy a techniky	Přednáška pro veřejnost „Chemická řeč přírody“	AV ČR	5.11.08, Národní 3, Praha

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Pořádající instituce	6 Datum a místo konání
31	Natura	Rozhovor na téma „Chemická komunikace“	ČRo Leonardo	Vysíláno 20.11.08 + 3 reprízy
32	Jak to vidí termity?	Přírodovědný pořad	ČRo 2	31.12.2007
33	Collection of Research highlights	Publication of International Research Highlights	German Chemical Society	Monthly Issue in their News magazine
34	Pořad „Vstupte!“	Živě vysílané hodinové interview o činnosti a výsledcích pracoviště	Český rozhlas Leonardo	11. 11. 08, Praha
35	Článek v Chemických Listech	Chem. Listy 102, 884–888 (2008) Nekovalentní interakce s přímou participací vodíku: vodíková vazba, nepravá vodíková vazba a dvouvodíková vazba		2008
36	10. ročník Školy hmotnostní spektrometrie	Cvičení interpretace spekter měkkých ionizačních technik	Univerzita Pardubice	22.-28. září 2008, Seč ČR
37	Demonstrace	Demonstrace zařízení pro kapilární a průtokové elektromigrační metody studentům Mat. fyz. fak. UK, obor biofyzika, FPBT VŠCHT, obor enzymové inženýrství	ÚOCHB AVČR	Květen 2008, Laboratoř elektromigračních metod ÚOCHB AVČR
38	Článek ve Vesmíru	Stále aktuální rezistence členovců, Vesmír 87, 144-145 (2008)		2008
39	Článek ve Vesmíru	Proč v Koreji nepotřebují kodlemon, Vesmír 87, 214 (2008)		2008

1e) domácí a zahraniční ocenění zaměstnanců pracoviště

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
1	Prof. Antonín Holý, DrSc.	Čestná profesura University of Manchester	Celoživotní dílo	University of Manchester

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
2	Prof. Antonín Holý, DrSc.	The John A. Montgomery Award 2008	Celoživotní přínos pro rozvoj chemie složek nukleových kyselin	The Center for Drug Design, University of Minnesota
3	Prof. Pavel Hobza, DrSc.	Česká hlava	Za celoživotní dílo a výzkum ve výpočetní chemii	Národní cena vlády Česká hlava ČR
4	Doc. Pavel Jungwirth, CSc.	Spiers Memorial Awards	Inovativní počítačová simulace povrchových procesů	Royal Society of Chemistry, UK
5	Doc. Dr. Detlef Schroeder	Invited professor (cat. A)	Fundamental studies in ion chemistry	UPMC, France
6	Ing. Jiří Šrogl, PhD.	Associate Adjunct Professor	Vědecká a pedagogická spolupráce.	Department of Molecular and Biomolecular engineering, North Carolina State university, Raleigh, USA
7	Ing. Ilya Lyapkalo, CSc.	Thieme Chemistry Journals Award 2008	Contributions to Thieme Journals	Editorial Boards of SYNTHESIS, SYNLETT and SYNFACTS
8	Ing. Filip Lankaš, CSc.	Fellowship J. E. Purkyně	Vědecká práce	AV ČR
9	Ing. Petr Jansa	2008 Gilead Sciences Fellowship	Vědecká činnost	Gilead Sciences, Inc. (California, USA)
10	Ing. Petr Jansa	2008 Award for the best poster (Organic Chemistry) - 60.	Poster	Asociace českých a slovenských

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
		Anniversary meeting of associations of Czech and Slovak chemical societies		chemických společností
11	Mgr. Radim Nencka, PhD.	The prize for Best Oral Communication of a Young Scientist on the XIV th Symposium on Chemistry of Nucleic Acid Components (SCNAC) v Českém Krumlově	Přednáška	Hodnotitelská komise XIV th SCNAC
12	Petr Koutník	1. cena SVOČ (Bakalářský program)	Bakalářská práce	FChT VŠCHT
13	Lukáš Severa	První místo za příspěvek na Studentské vědecké konferenci VŠCHT, 21.11.2008	[7]HELQUAT: Robustní třístupňová syntéza vysoce helikálních dikationtů - Experimentální a teoretická studie série helquatů	VŠCHT

1f) další specifické informace o pracovišti

- Přípravy na rekonstrukci a dostavbu areálu ÚOCHB v Praze 6 – Dejvicích dospěly do stadia dokumentace pro územní řízení a dokumentace pro stavební povolení. Začátek realizace se předpokládá v druhé polovině roku 2009.

- Ve spolupráci s Dozorčí radou ÚOCHB a vedením AV ČR byl na základě odborného posudku firmy McKinsey a advokátní kanceláře VKŠ zpracován materiál pro vznik TTO-IOCB (Technology Transfer Office), který bude základem vzniku dceřiné společnosti ÚOCHB pro převod duševního vlastnictví do praxe. Tento materiál má obecnější platnost a lze jej aplikovat i v jiných ústavech AV ČR.
- Získání ceny Praemium Academiae velmi významně zkvalitnilo finanční zabezpečení skupiny výpočetní chemie a dovolilo rozšířit tým o kvalitní zahraniční postdoky jakož i zahraniční hostující profesory. V souvislosti s pokračováním magisterského studia v oboru Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur na našem pracovišti byl tým též rozšířen o studenty magisterského studia. Pracovní tým se rozšířil o tři studenty bakalářského studia.
- V roce 2008 byla v Laboratoři radioisotopů připravena řada radionuklidů značených sloučenin pro potřeby výzkumných týmů jak z ÚOCHB tak i mimo ÚOCHB (v rámci mezinárodní spolupráce).

2. Vědecká a pedagogická spolupráce pracoviště s vysokými školami

2a) nejvýznamnější vědecké výsledky pracoviště vzniklé ve spolupráci s vysokými školami (kromě výsledků uvedených v bodě 2 b)

1 Číslo	2 Popis výsledku včetně uplatnění	3 Forma spolupráce	4 Spolupracující VŠ	5 Číslo citace
1	Porovnání buněčných kultur epitelových buněk získaných z metastazujících a nemetastazujících nádorů prsu pomocí dvojrozměrné elektroforetické analýzy	IGA grant	1. LF UK	31
2	Ve spolupráci s Ústavem biologie a lékařské genetiky 1. LF UK a VFN, Praha byl studován vliv látky PMEG na expresi proangiogenních genů <i>in vivo</i> na modelu SD-lymfomu potkana. Výsledky ukazují na signifikantní inhibici regulace exprese genů <i>EGF</i> , <i>FGF</i> , <i>PDGF</i> , <i>VEGF</i> , <i>EGFR</i> , <i>FGFR</i> , <i>PDGFR</i> a <i>VEGFR</i> . Práce byla zaslána k publikaci do <i>Anticancer Research</i> . Společné studie o mechanismu cytostatických účinků acyklických nukleosidfosfonátů byly shrnuty v souborném článku. : Společné aktivity byly zaměřeny na testování vlivu nových sloučenin na buněčnou proliferaci (XTT test, průtoková cytometrie).		Univerzita Karlova	46,47

3	Pedagogická činnost: Předmět Bioorganická chemie, rozsah 1 semestr, ukončeno zkouškou. Přednáší: Prof. Antonín Holý a Mgr. Petra Doláková	přednášky	Univerzita Palackého, Olomouc	
4	D-typ retrovirů, jehož zástupcem je M-PMV, skládá nezralé virové částice v cytoplasmě infikované buňky. Byl identifikován buněčný protein Tctex-1-součást dyneinového motoru, který se podílí na transportu retrovirových polyproteinů na místo skládání v hostitelských buňkách. Tctex-1 specificky interaguje s M-PMV matrixovým proteinem. Mutace R55F v matrixovém proteinu (MA) změnila místo skládání z cytoplasmy na cytoplasmatickou membránu. Porovnáním NMR struktur MA wt a R55F mutantu byla identifikována strukturní změna, zabraňující vazbě Tctex-1 k R55F MA.	ESF Euroscope - GA ČR	VŠCHT	53
5	Příprava nových steroidních komplexů platiny a jejich testování na protinádorovou aktivitu.	smlouva	Univerzita Palackého v Olomouci	72
6	Příprava sirných triterpenoidů a jejich testování na protinádorovou aktivitu	smlouva	Univerzita Karlova v Praze	73
7	Vyvinuli jsme třístupňovou syntézu nové třídy helikálních extendovaných diquatů (helquatů). Helquaty představují novou kombinaci strukturních motivů typických pro heliceny a viologeny. Lze očekávat, že propojení těchto, dosud oddělených, oblastí výzkumu otevře atraktivní badatelská témata. Základní helquat představuje vodorozpustný modrý fluorofor a lze jej připravit pomocí unikátní kovem katalyzované [2+2+2] cykloizomerace ve vodě v přítomnosti vzduchu.	Rentgenostrukturní analýza, kvantově chemické výpočty, měření fluorescenční charakteristiky látek	Univerzita Karlova, VŠCHT Praha, University of Zurich	82, 83
8	Byla vyvinuta syntéza série nových bidentálních pyridinů. Syntéza vychází ze společného prekurzoru, který lze snadno získat z β -pinenu. Komplex mědi obsahující ligand s pyridinovou a oxazolinovou jednotkou katalyzuje asymetrickou allylovou oxidaci cyklických olefinů s dobrou rychlostí konverze a přijatelnou enantioselektivitou ($\leq 67\%$ ee). Imidazoliová sůl byla identifikována jako prekurzor N,N'-nesymetrického N-heterocyklického karbenu, jehož palladiový komplex	Spolupráce na publikačním výstupu z postdoktorského projektu	University of Glasgow	86

	katalyzuje intramolekulární α -arylace amidového enolátu. Takto byl připraven oxindol ve vysokém výtěžku s nízkou enantioselektivitou.			
9	Srovnání chemického složení a antibakteriální aktivity silice <i>Nigella sativa</i> , získané různými extrakčními metodami.	GA ČR	ČZU Praha	100
10	Vývoj nových katalyzátorů pro enantioselektivní reakce.		UK Praha	101
11	Studium metabolismu a oběhu radioaktivně značeného juvenogenu v modelovém systému, tvořeném skupinou termitů, substrátem a potravou, s důrazem na výslednou kontaminaci prostředí.		UK	102
12	Charakterizace peritrofické membrány ve střevě roztoče <i>Acarus siro</i> . Bylo ověřeno, že látky ovlivňující biosyntézu nebo ukládání chitinu lze použít k regulaci populací tohoto významného škůdce		UK	103
13	Identifikace nových metabolitů PCB vznikajících v rostlinách – methoxy-PCB a hydroxy-methoxy-PCB	grant GAČR	VŠCHT Praha	106
14	Určení flexibility vnitřní rotace v silylovaných fenolech pomocí skalárních spin-spinových štěpících konstant.	GACR	MFFUK	119
15	Ab initio modelování elektronického cirkulárního dichroismu v porfyrinovém chromoforu	GA AV	VŠCHT Praha	120
16	Kapilární afinitní elektroforéza byla využita ke stanovení konstant stability komplexů makrocyclického depsipeptidového antibiotika valinomycinu s amonným iontem a ionty alkalických kovů (K^+ , Cs^+ , Na^+ , Li^+) v methanolu. Vyvinutou metodikou pro měření závislosti efektivní elektroforetické pohyblivosti valinomycinu na koncentraci komplexujícího iontu v základním elektrolytu bylo možno kvantitativně charakterizovat silné i slabé interakce valinomycinu s výše uvedenými ionty. Pomocí teorie funkcionálu hustoty byla určena nejpravděpodobnější struktura komplexu valinomycinu s amonným kationtem.	GA ČR, MŠMT ČR	Západočeská universita, Fakulta aplikovaných věd, Plzeň	148,1 49,15 0

2b) nejvýznamnější výsledky činnosti výzkumných center a dalších společných pracovišť AV ČR s vysokými školami

Pořadové číslo: 1

Název společného pracoviště česky: Centrum chemické genetiky

Název společného pracoviště anglicky: Center of Chemical Genetics

Kategorie společného pracoviště: LC06077

Dosažený výsledek: Strukturně diverzifikované nukleosidfosfonové kyseliny jako bisubstrátové inhibitory thymidinfosforylázy.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Panova, N. - Kóšiová, I. - Petrová, M. - Vaněk, V. - Liboska, R. - Kovačková, S. - Kočalka, P. - Králíková, Š. - Točík, Z. - Páv, O. - Pačes, O. - Rejman, D. - Rosenberg, I.: Nucleoside phosphonic acids in thymidine phosphorylase inhibition: Structure - activity relationship. Nucleic Acids Symposium Series. -, č. 52 (2008), s. 665-666.

Pořadové číslo: 2

Název společného pracoviště česky: Centrum chemické genetiky

Název společného pracoviště anglicky: Center of Chemical Genetics

Kategorie společného pracoviště: LC06077

Dosažený výsledek: Nové analogy nukleosid 3'-fosfátů s prolinolovým kruhem nesoucím konformačně flexibilní 3'-N-methylfosfonátovou skupinu – stavební jednotky modifikovaných oligonukleotidů.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Vaněk, V. - Buděšínský, M. - Liboska, R. - Hurychová, V. - Rosenberg, I.: Prolinol-based nucleoside phosphonic acids: Synthesis and properties. Nucleic Acids Symposium Series. -, č. 52 (2008), s. 537-538.

Pořadové číslo: 3

Název společného pracoviště česky: Centrum chemické genetiky

Název společného pracoviště anglicky: Center of Chemical Genetics

Kategorie společného pracoviště: LC06077

Dosažený výsledek: Lipofilní thia congenery (5'-S) dříve připravených nukleosid 5'-O-methylfosfonátů, které mohou vykazovat obdobné vlastnosti jako fosforothioáty.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Kóšiová, I. - Rosenberg, I.: Synthesis of nucleoside 5'-S-methylphosphonates and related compounds. Nucleic Acids Symposium Series. -, č. 52 (2008), s. 569-570.

Pořadové číslo: 4

Název společného pracoviště česky: Centrum buněčné invazivity v embryonálním vývoji a metastázách nádorů

Název společného pracoviště anglicky: Center of Cell Invasiveness in Embryonic Development and Tumour Metastases

Kategorie společného pracoviště: LC06061

Dosažený výsledek: Oligodeoxynukleosidy obsahující nukleosid 2',3'-O-methylidenfosfonáty (S-epimery) vykazují oproti kontrole, zvýšenou teplotu tání hybridního duplexu.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Liboska, R. - Petrová, M. - Pohl, R. - Buděšínský, M. - Hurychová, V. - Rosenberg, I.: Chiral phosphonate internucleotide linkage: A promising modification for chimeric oligonucleotides? Nucleic Acids Symposium Series. -, č. 52 (2008), s. 317-318.

Pořadové číslo: 5

Název společného pracoviště česky: Centrum buněčné invazivity v embryonálním vývoji a metastázách nádorů

Název společného pracoviště anglicky: Center of Cell Invasiveness in Embryonic Development and Tumour Metastases

Kategorie společného pracoviště: LC06061

Dosažený výsledek: Syntéza epimerně čistých plně chráněných ribonukleosid 5'-C-fosfonátů jako stavebních bloků pro syntézu modifikovaných oligoribonukleotidů.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Petrová, M. - Králíková, Š. - Buděšínský, M. - Rosenberg, I.: From ribonucleoside 5'-aldehydes to ribonucleoside 5'-C-phosphonates as building blocks for oligonucleotide synthesis. Nucleic Acids Symposium Series. -, č. 52 (2008), s. 591-592.

Pořadové číslo: 6

Název společného pracoviště česky: Centrum buněčné invazivity v embryonálním vývoji a metastázách nádorů

Název společného pracoviště anglicky: Center of Cell Invasiveness in Embryonic Development and Tumour Metastases

Kategorie společného pracoviště: LC06061

Dosažený výsledek: Objasnění snížené hybridizace isosterních fosfonátových oligonukleotidů s C3'-O-P-CH₂-O-C4'' internukleotidovou vazbou na základě konformační analýzy modifikovaného TpT dimeru.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Točík, Z. - Buděšínský, M. - Barvík Jr., I. - Rosenberg, I.: On the stereochemistry of C3'-O-P-CH₂-O-C4'' phosphonate internucleotide bond, a phosphate isostere. Nucleic Acids Symposium Series. -, č. 52 (2008), s. 427-428.

Pořadové číslo: 7

Název společného pracoviště česky: Centrum nových antivirotik a antineoplastik

Název společného pracoviště anglicky: Centre of new antivirals and antineoplastics

Kategorie společného pracoviště: 1M centrum

Dosažený výsledek: Retrovirový kapsidový protein (CA) zprostředkovává interakce vedoucí ke skládání jak nezralé, tak zralé virové částice. Pro studium role Pro1 a s ním interagujících Asp zbytků v CA M-PMV při skládání zralého core, byly do sekvence CA zavedeny bodové mutace P1A, P1Y, D50A, T54A a D57A. Mutace P1A a D57A blokovaly štěpení polyproteinu Gag, virové částice měly poškozená core a byly neinfekční. Tato data naznačují, že oblast CA, zahrnující Asp50-Asp57 hraje důležitou roli ve stabilizaci β -smyčky při tvorbě zralé virové částice.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 53

Pořadové číslo: 8

Název společného pracoviště česky: Centrum molekulární biologie a fyziologie společenstev kvasinek

Název společného pracoviště anglicky: Centre of molecular biology and physiology of yeast communication.

Kategorie společného pracoviště: centrum základního výzkumu LC

Dosažený výsledek: Byl naklonován gen kódující delta9 desaturasu pomocí cDNA získané z RNA feromonové žlázy a tukového tělesa. Tato desaturasa upřednostňuje osmnáctiuhlíkovou nasycenou mastnou kyselinu jako substrát. Výsledky z experimentů prokazují, že byla získána metabolická desaturasa podílející se na metabolismu tuků.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 52

Pořadové číslo: 9

Název společného pracoviště česky: Centrum molekulární biologie a fyziologie společenstev kvasinek

Název společného pracoviště anglicky: Centre of molecular biology and physiology of yeast communication.

Kategorie společného pracoviště: centrum základního výzkumu LC

Dosažený výsledek: Souhrnný článek obsahující současné informace o sekretovaných proteasách a lipasách z *Candida albicans*

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 55

Pořadové číslo: 10

Název společného pracoviště česky: Centrum molekulární biologie a fyziologie společenstev kvasinek

Název společného pracoviště anglicky: Centre of molecular biology and physiology of yeast communication.

Kategorie společného pracoviště: centrum základního výzkumu LC

Dosažený výsledek: Byl identifikován protein CR3-RP (protein podobný CR3 adhezivnímu receptoru) u *C. albicans*. Blokování tohoto proteinu polyklonálními protilátkami snížilo schopnost *C. albicans* adherovat k buňkám epitelu a ovlivnilo tvorbu a tloušťku biofilmu, pozorovanou skenovacím konfokálním mikroskopem. Tyto výsledky ukazují, že CR3-RP by mohl sloužit pro vývoj vakcíny.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 56

Pořadové číslo: 11

Název společného pracoviště česky: Centrum nových antivirových a antineoplastických

Název společného pracoviště anglicky: Centre of new antivirals and antineoplastics

Kategorie společného pracoviště: 1M centrum

Dosažený výsledek: Při řešení 3D struktury N-terminální domény kapsidového proteinu z Mason-Pfizerova opičího viru pomocí NMRV byly přiřazeny ¹H, ¹³C, a ¹⁵N resonance hlavní páteře a postranních řetězců proteinu.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 51

Pořadové číslo: 12

Název společného pracoviště česky: Výzkumné centrum nových virostatik a cytostatik, 1M0508

Název společného pracoviště anglicky: Centre for new Antivirals and Antineoplastics

Kategorie společného pracoviště: 1 M centrum

Dosažený výsledek: viz 1b-2

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 61

Pořadové číslo: 13

Název společného pracoviště česky: Výzkumné centrum nových virostatik a cytostatik, 1M0508

Název společného pracoviště anglicky: Centre for new Antivirals and Antineoplastics

Kategorie společného pracoviště: 1 M centrum

Dosažený výsledek: Karborany jako účinné a specifické inhibitory překonávající antivirovou resistenci u HIV
Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 62

Pořadové číslo: 14

Název společného pracoviště česky: Centrum funkční genomiky a proteomiky ve šlechtění rostlin

Název společného pracoviště anglicky: Center of functional genomics and proteomics in plant breeding

Kategorie společného pracoviště: 1M centrum

Dosažený výsledek: Zvýšení aktivity klíčového enzymu fotosyntézy vlivem oxysterolů evropský patent, český patent

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 110,114,115

Pořadové číslo: 15

Název společného pracoviště česky: Centrum funkční genomiky a proteomiky ve šlechtění rostlin

Název společného pracoviště anglicky: Center of functional genomics and proteomics in plant breeding

Kategorie společného pracoviště: 1M centrum

Dosažený výsledek: příprava genů, příprava GM rostlin, předání materiálu spolupracující firmě

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: 109,113

Pořadové číslo: 16

Název společného pracoviště česky: Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů

Název společného pracoviště anglicky: Center for Complex Molecular Systems and Biomolecules

Kategorie společného pracoviště: LC

Dosažený výsledek: Komplex tryptophane a prolinu získaný z experimentálních struktur byl zkoumán procedurami kvantové chemie schopnými popsat Londonovu disperzní energii. Pro potvrzení strukturálních a energetických rysů zodpovědných za tuto extrémní stabilizaci byla studována role dusíkového heteroatomu a cyklizace struktury. Ukazujeme, že elektrostatické interakce způsobené dipólovým momentem dusíku přispívají nejvíce k této stabilizaci

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Biedermannová, L. - Riley, K. E. - Berka, K. - Hobza, P. - Vondrášek, J.: Another role of proline: stabilization interactions in proteins and protein complexes concerning proline and tryptophane. Physical Chemistry Chemical Physics. Roč. 10, č. 42 (2008), s. 6350-6359.

Pořadové číslo: 17

Název společného pracoviště česky: Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů

Název společného pracoviště anglicky: Center for Complex Molecular Systems and Biomolecules

Kategorie společného pracoviště: LC

Dosažený výsledek: Naše předchozí přesné výpočty na úrovni CCSD(T)/CBS byly shrnuty do nové databáze nazvané begdb (Benchmark Energy and Geometry Database). Připravili jsme internetové rozhraní k této databázi, které je dostupné na www.bagdb.com.

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Řezáč, J. - Jurečka, P. - Riley, K. E. - Černý, J. - Valdes, H. - Pluháčková, K. - Berka, K. - Řezáč, T. - Pitoňák, M. - Vondrášek, J. - Hobza, P.: Quantum chemical benchmark energy and geometry database for molecular clusters and complex molecular systems (www.begdb.com): a users manual and examples. Collection of Czechoslovak Chemical Communications. Roč. 73, č. 10 (2008), s. 1261-1270.

2c) spolupráce s vysokými školami na uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů

1 Číslo	2 Bakalářský program	3 Spolupracující VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Organická chemie I,II,b	PřF UK, Praha	ANO	ANO			
2	Biochemie	PřF UK Praha	ANO		ANO		Labor. kurs
3	Klinická a toxikologická analýza	PřF UK Praha			ANO		
4	Chemie v přírodních vědách	PřFUK Praha			ANO		
5	Aplikovaná chemie a materiály	VŠCHT Praha			ANO		
6	Organická chemie	VŠCHT Praha	ANO		ANO		
7	Chemie	VŠCHT, Fakulta chemicko-inženýrská			ANO		
8	Potravinářství a biotechnologie	VŠCHT Praha			ANO		

1 Číslo	2 Magisterský program	3 Spolupracující VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Organická chemie	PřF UK Praha	ANO	ANO	ANO		
2	Organická chemie, KATA	PřF UK Praha	ANO		ANO		
3	Biochemie	PřF UK Praha	ANO		ANO		
4	Biochemie a biotechnologie	PřFUK Praha	ANO				
5	Klinická a toxikologická analýza	PřF UK Praha			ANO		
6	Analytická chemie	PřFUK Praha	ANO		ANO		
7	Klinická a toxikologická analýza	PřF UK, Praha			ANO		
8	Chemie životního prostředí	PřF UK Praha			ANO		
9	Zoologie	PřF UK Praha	ANO	ANO	ANO		
10	Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur	PřF UK Praha	ANO	ANO	ANO	ANO	
11	Všeobecné lékařství	1LF UK Praha	ANO		ANO		
12	Fyzika	MFF UK Praha	ANO	ANO	ANO	ANO	
13	Biofyzika	MFF UK, Praha	ANO				
14	Mikrobiologie	VŠCHT Praha			ANO		
15	Biochemie	VŠCHT Praha			ANO		
16	Bioorganická chemie	VŠCHT Praha	ANO				
17	Organická chemie a farmakochemie	VŠCHT Praha			ANO		
18	Mechanismy organických reakcí	VŠCHT Praha	ANO	ANO			
19	Chemie přírodních látek	VŠCHT Praha	ANO				
20	Biochemie a biotechnologie	VŠCHT Praha	ANO		ANO		
21	Syntéza a výroba léčiv	VŠCHT Praha			ANO		
22	Analytická chemie	VŠCHT Praha		ANO			
23	Enzymové inženýrství	FPBT VŠCHT, Praha	ANO				
24	Organická chemie	TUL Liberec			ANO		
25	Fyziologie	JUČB fakulta biologická	ANO	ANO			

1 Číslo	2 Doktorský program	3 Spolupracující VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Organická chemie	PřF UK Praha			ANO		
2	Biochemie	PřF UK Praha	ANO		ANO		
3	Spektrální metody NMR I	PřF UK Praha	ANO	ANO		ANO	
4	Spektrální metody NMR II	PřF UK Praha	ANO			ANO	
5	Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur	PřF UK Praha	ANO	ANO	ANO	ANO	
6	Analytická chemie	PřF UK Praha	ANO		ANO		
7	Etologie a smyslová fyziologie hmyzu	PřF UK Praha	ANO			ANO	
8	Fyzika	MFF UK Praha			ANO		
9	Biochemie	1. LF UK Praha			ANO		
10	Organická chemie	VŠCHT Praha	ANO		ANO		
11	Biochemie	VŠCHT Praha			ANO		
12	Mikrobiologie	VŠCHT Praha			ANO		
13	Analytická chemie	VŠCHT Praha			ANO		
14	Chemie - organická chemie	MU Brno			ANO		
15	Ekologie	ČZU Praha-Suchdol			ANO		
16	Etologie hmyzu	JUČB fakulta biologická	ANO				

2d) vzdělávání středoškolské mládeže

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel/škola	4 Činnost
1	Vedení maturitní práce	Gymázium, 5.Května, Praha 4	Vedení experimentální a teoretické práce
2	Studentská odborná činnost	ÚOCHB AV ČR	Teoretická a experimentální práce v laboratoři, spoluúčast na

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel/škola	4 Činnost
			výzkumu
3	Přípravný kurz Organické chemie	PřF UK	2 x 6 hodin přednášky
4	Přípravný kurs na chemickou olympiádu pro středoškolské studenty, 3.-7.3.2008, Konferenční centrum VŠCHT, kolej Sázava	Národní institut dětí a mládeže	Série přednášek z organické chemie, VŠCHT, Praha
5	Cyklus zvaných přednášek	Gymnázium Broumov	2 přednášky pro studenty, 1 pro veřejnost

3. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou

3a) společné projekty výzkumu a vývoje

Pořadové číslo: 1

Název projektu /programu v češtině: Navázání spolupráce s Armádou České republiky - centrem biologické ochrany (Těchonín) při vývoji potenciálních léků na Antrax a černý kašel.

Název projektu/programu v angličtině:

Poskytovatel:

Partnerská organizace: Armáda České republiky

Dosažený výsledek:

Uplatnění/Citace výstupu:

Pořadové číslo: 2

Název projektu /programu v češtině: Mikrobiologická kultivační média a novými inhibičními komponentami

Název projektu/programu v angličtině: Microbial Culture Media with Novel Inhibitory Components

Poskytovatel: MPO

Partnerská organizace: Trios, spol. s.r.o.

Dosažený výsledek: Započaty práce na rešerši vědeckých informací
Uplatnění/Citace výstupu:

Pořadové číslo: 3

Název projektu /programu v češtině: Čmeláci jako aktivní prvek biodiverzity krajiny.

Název projektu/programu v angličtině: Bumblebees as an active element of the environment biodiversity.

Poskytovatel: MŠMT

Partnerská organizace: Výzkumný ústav pícninářský, s.r.o.; Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

Dosažený výsledek: Dynamika produkce samčích i samičích sexuálních feromonů čmeláka zemního v průběhu jejich života.

Uplatnění/Citace výstupu: 92,93

Pořadové číslo: 4

Název projektu /programu v češtině: Biodegradace polybromovaných sloučenin, monitorování změn v koncentraci cílových polutantů a meziproductů odbourávání v životním prostředí

Název projektu/programu v angličtině: Biodegradation of polybrominated compounds, monitoring of concentration changes of target pollutants and degradation products in the environment.

Poskytovatel: MŠMT/NPVII

Partnerská organizace: Vidia s.r.o., Vestec, ENVISAN GEM a.s., Č. Budějovice, Earth Tech CZ Praha

Dosažený výsledek: Předběžné výsledky s cílovými polutanty

Uplatnění/Citace výstupu: 105,106,107,111,112

Pořadové číslo: 5

Název projektu /programu v češtině: Afinitní kapilární elektroforéza a elektrochromatografie a jejich využití pro studium interakcí biomolekul.

Název projektu/programu v angličtině: Affinity capillary electrophoresis and electrochromatography and their use for study of biomolecular interactions

Poskytovatel: GA ČR

Partnerská organizace: Fyziologický ústav AV ČR, v.v.i., Kardiovaskulární výzkumné centrum, Praha

Dosažený výsledek: Nově vyvinuté metody kapilární elektroforézy a kapalinové chromatografie on-line spojené s hmotnostní spektrometrickou detekcí byly využity pro analýzu nerozpustných bílkovin izolovaných z matrice ptačích vaječných skořápek. Získané výsledky potvrdily komplementaritu obou metod.

Uplatnění/Citace výstupu: Mikšík, I. - Sedláková, P. - Mikulíková, K. - Eckhardt, A. - Kašička, V.: Comparison of CE-MS and LC-MS analyses of avian eggshell matrix proteins, *Chromatographia*. Roč. 67, Spec. č. (2008), s. S89-S96.

Pořadové číslo: 6

Název projektu /programu v češtině: Studium vzniku sekundárních částic z plynných prekurzorů a jejich podílu na celkové imisní zátěži, dílčí projekt DP3, Studium podílu bioaerosolů na imisní zátěži území České republiky suspendovanými částicemi.

Název projektu/programu v angličtině: Study of the generation of secondary particles from gaseous precursors and their participation on the total immission load, partial project DP3, Study of the participation of bioaerosols on the total immission load of the territory of the Czech Republic by suspended particles.

Poskytovatel: Ministerstvo životního prostředí ČR

Partnerská organizace: Státní zdravotní ústav, Praha

Dosažený výsledek: Byly provedeny analýzy vzorků aerosolů obsahující alergenní složky biogenního původu kapilární elektroforézou. Při analýze kapalných extraktů ze vzdušného prachu zachyceného na mikroporézních filtrech byly zjištěny významné rozdíly v množství extrahovaných látek v závislosti na ročním období (březen-říjen) a na lokalitě jejich odběru (Státní zdravotní ústav Praha a Zdravotní ústav se sídlem v Jihlavě, územní pracoviště Havlíčkův Brod).

Uplatnění/Citace výstupu: Kotlík, B. - Keder, J. - Kašička, V. - Matějů, L. - Sázelová, P. - Kazmarová, H.: Assessment of UV-positive particles in extracts of the urban aerosol. European Aerosol Conference 2008 - sborník abstrakt, Thessaloniki, Greece, 2008. Abstrakt T06A224P.

Pořadové číslo: 7

Název projektu /programu v češtině: Použití ultrazvuku v nanomedicině

Název projektu/programu v angličtině: The Use of Ultrasound in Nanomedicine

Poskytovatel: Grantová agentura Akademie věd ČR v rámci programu „Nanobiologie a nanomedicína“ (KAN200520703).

Partnerská organizace: CPN spol. s.r.o., 561 02 Dolní Dpbrouč 401

Dosažený výsledek: Syntéza oligosachridů D-mannosaminového typu jako potenciálních vektorů k nádorové tkáni

Uplatnění/Citace výstupu: 156

Pořadové číslo: 8

Název projektu /programu v češtině: Bioaktivní biokompatibilní povrchy a nové nanostrukturované kompozity pro aplikace v medicíně

Název projektu/programu v angličtině: Bioactive Biocompatible Surface and Novel Nanostructured Composites for Medicine and Drug Delivery

Poskytovatel: agentura Akademie věd ČR v rámci programu „Nanobiologie a nanomedicína“ (200100801)

Partnerská organizace: Zentiva a.s. Praha

Dosažený výsledek: Chemická modifikace povrchu nanodiamantů

Uplatnění/Citace výstupu: předběžné výsledky

3b) výsledky výzkumu a vývoje pro ekonomickou sféru (případně dosažené ve spolupráci s touto sférou) na základě hospodářských smluv

1 Číslo	2 Zadavatel	3 Výsledek (anotace)	4 Uplatnění
1	Gilead Sciences	Zahájení klinického testování (Fáze I) acyklického nukleotidového analoga GS-9219	Probíhá testování na 5 pracovištích v ČR
2	Abbott Laboratories ČR	Vypracována databáze mutací nalezených u HIV pozitivních pacientů léčených PR inhibítorem Kaletra, objevení klíčových mutací odpovědných za resistenci	Úprava léčby HIV pozitivních pacientů (FN Bulovka) Viz citace č. 64

Celkový počet získaných výsledků

2

3c) nové firmy, které vznikly na základě výsledků činnosti pracoviště v oblasti aplikovaného výzkumu

1 Číslo	2 Název firmy	3 Důvod založení	4 Kategorie firmy	5 Činnost firmy
1	OKAPI Sciences	Veterinární aplikace virostatik	Spin-off	Příprava látek a biologické testy

3d) odborné expertizy zpracované v písemné formě pro státní orgány, instituce a podnikatelské subjekty

1 Číslo	2 Název	3 Příjemce/zadavatel	4 Popis výsledku
1	Posudky grantů a řešení Centrum, NPVII	MŠMT	cca 30
2	Posudky projektů pro grantové agentury	GAČR, GAAV, MPO, MZ, MZV	cca 170
3	Posudky na diplomové a disertační práce	Vysoké školy	cca 150

Celkový počet zpracovaných expertiz	cca 350
--	---------

4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

4a) přehled mezinárodních projektů, které pracoviště řeší v rámci mezinárodních vědeckých programů

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Koordínátor/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
1	HFSP0	Human Frontier Science Program	Probing the mechanism of the cleavage reaction in catalytic RNAs	koordinátor: Tanaka – Japan řešitel z ÚOCHB - Sychrovský	Kato, Matsuda-Japan / 3	USA, Japonsko	
2	NIH			Hocek			
3	NIH			Holý			
4	NIH	Fogarty Int. Res. Collab. Award	Tranzitní stav napodobující inhibitory lidské BHMT/Transition-state mimicking inhibitors of human BHMT (2006-2008)	T.A. Garrow/Jiráček	0	USA/ČR	Syntéza a biologická charakterizace inhibitorů lidského metaloenzymu

1	2	3	4	5	6	7	8
Číslo	Název zastřešující organizace (zkratka)	Název programu česky/anglicky	Název projektu česky/anglicky	Koordinátor/řešitel česky/anglicky	Spoluřešitel /počet	Stát(y)	Aktivita
							betain-homocystein S-methyltransferázy
5	MŠMT	INGO/INGO	Aktivní účast v Hlavním výboru Středoevropské divize International Isotope Society/ Participation in the work of the steering board of the Central Europe Division of International Isotope Society	Elbert	Gay J.	Německo	
6	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Studium biologicky aktivních látek využitelných pro kontrolu zavijče Eusophera batangensis, škůdce ovocné dřeviny cicimku jujuba (Ziziphus jujuba)/ Research of biologically active compounds for the control of the Moth Euzophera batangensis, a serious pest of jujuba trees (Ziziphus jujuba)	Hoskovec	Xiuun Wen, Zhang Zhen		
7	MŠMT	Regionální a mezinárodní spolupráce ve výzkumu (Národní program výzkumu)/ Programme of regional and international cooperation in R&D (National	EMSI Integrovaný atmosferický výzkum s využitím chemie na površích/ Environmental molecular science institute (EMSI): Atmospheric integrated research using chemistry at interfaces	Roeselová			

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Koordinátor/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
		programme of research)					
8	MŠMT	COST/ COST	Makrocyclizace za podmínek thermodynamické rovnováhy: výběr velikosti a tvaru z dynamických knihoven vlivem templátového efektu/ Thermodynamically controlled macrocyclization: size and shape selection from dynamic libraries through template effects	Kraus	Schalley Ch.	Německo	
9	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Strukturní studie transkripčních regulátorů rodiny DeoR a GntR účastnících se katabolické represe v bakterii Bacillus subtilis. Název anglicky Structural studies of transcriptional regulators of the DeoR and GntR families involved in catabolic repression in Bacillus subtilis.	Řezáčová	Otwinowski Zbyszek, UT Southwestern Medical Center at Dallas	USA	
10	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Izolace a identifikace biologicky aktivních organických látek z mechanicky aktivovaného slovenského hnědého uhlí/ Isolation and identification of biologically active organic compounds from mechanically activated Slovak brown coal	Cvačka	Anton Zubrik Ústav geotechniky, SAV Košice	Slovenská republika	

1	2	3	4	5	6	7	8
Číslo	Název zastřešující organizace (zkratka)	Název programu česky/anglicky	Název projektu česky/anglicky	Koordinátor/řešitel česky/anglicky	Spoluřešitel /počet	Stát(y)	Aktivita
11	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Teoretické studium procesu adsorpce a inkorporace atmosferických polutantů na povrchu ledu dopovaného plynnými příměsemi/ Theoretical study on process of adsorption and incorporation of atmosphere pollutants on the surface of ice doped by gaseous additives	Roeselová	Picaud S. LPM, CNRS-IMR	Francie	
12	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Vývoj hybridních organicko-anorganických materiálů a modelů chirálních povrchů odvozených od trianglaminů: vlastnosti a aplikace Název anglicky Development of organic-inorganic hybrid materials and models of chiral surfaces derived from trianglaminines; properties and application	Hodačová	Michel Wong, Chi Man, ENSCH Montpellier	Francie	
13	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Srovnávací studie teoretických metod kvantové chemie a experimentálních metod multinukleární spektroskopie NMR pro spektroskopické parametry, které jsou významné z hlediska určování struktury peptidů a nukleových kyselin/ Comparative Study of Quantum Chemical Computation and Experimental Multi-nuclear NMR of Structurally Relevant NMR Parameters in Peptides and	Sychrovský	Müller N., J. Keppler Univ. Linz	Rakousko	

1	2	3	4	5	6	7	8
Číslo	Název zastřešující organizace (zkratka)	Název programu česky/anglicky	Název projektu česky/anglicky	Koordinátor/řešitel česky/anglicky	Spoluřešitel /počet	Stát(y)	Aktivita
			Nucleic Acids				
14	Sandler Family Support. Found.	Základní výzkum parasitických onemocnění/Ba sic Research in Parasitic Diseases	Trávicí proteasy krevsajících parazitů/Digestive proteases of blood- feeding parasites	Sandler Center for Basic Research in Parasitic Diseases (C. Caffrey)	M. Horn (ÚOCHB AV ČR)	USA, ČR	Vývoj nových antiparasitik
15	RS	International Joint Project	Dělení energie při reakcích dikationtů /Energy partitioning in dication charge- transfer reactions	Price	Schröder	UK / CR	měření
16	AVCR	Spoluprce AVCR/CNR	Nové sloučeniny vzácných plynů / New rare-gas compounds	Ascenzi	Schröder	Italy / CR	měření
17	EU	TNA	Přístup na CLIO / Access to CLIO	P. Maitre	Schröder	France / CR	měření
18	EU	TNA	Přístup na SOLEIL / Access to SOLEIL	L. Nahon	Schröder	France / CR	měření
19	AirUCI	Environmental Molecular Science Institute	Atmospheric integrated research for understanding chemistry at interfaces/Atmosférický integrovaný výzkum k porozumění chemie na rozhranních	Prof. Barbara Finlayson-Pitts, UC Irvine	Jungwirth	USA, Nový Zéland, ČR	společný výzkum

4b) nejvýznamnější vědecké výsledky pracoviště dosažené v rámci mezinárodní spolupráce

Pořadové číslo: 1

Název programu: 6th FW

Název projektu: EMIL

Koordinátor/řešitel (česky): Prof. B. Tavitian, CEA, Paris, France

Koordinátor/řešitel (anglicky): Prof. B. Tavitian, CEA, Paris, France

Význačný výsledek: Ex post značení nukleových kyselin Dielsovou-Alderovou reakcí

Uplatnění/Citace: patent v přípravě

Pořadové číslo: 2

Název programu: Sandler Family Supporting Foundation

Název projektu: Základní výzkum parazitických onemocnění/Basic Research in Parasitic Diseases

Koordinátor/řešitel (česky): M. Horn

Koordinátor/řešitel (anglicky): C. Caffrey

Význačný výsledek: Klíště *Ixodes ricinus* je přenašečem klíšťové encefalitidy a lymfské boreliózy. Identifikovali jsme trávicí proteasy nezbytné pro metabolismus klíštěte jako nové perspektivní antigeny pro vývoj vakcíny proti klíšťatům.

Uplatnění/Citace: 69

Pořadové číslo: 3

Název programu: International Joint Project

Název projektu: Studies of energy partitioning in dication charge-transfer reactions

Koordinátor/řešitel (česky): D. Schröder

Koordinátor/řešitel (anglicky): S. D. Price

Význačný výsledek: New bond-forming reactions of molecular dications

Uplatnění/Citace: Ricketts, C. L. - Schröder, D. - Roithová, J. - Schwarz, H. - Thissen, R. - Dutuit, O. - Žabka, J. - Herman, Z. - Price, S. D.: Competition of electron transfer, dissociation, and bond-forming reactions in collisions of CO_2^{2+} with neutral CO_2 . Physical Chemistry Chemical Physics. Roč. 10 (2008) s. 5135-5143.

Ascenzi, D. - Tosi, P. - Roithová, J. - Ricketts, C. L. - Schröder, D. - Lockyear, J. F. - Parkes, M. A. Price, S. D. : Generation of the organo-rare gas dications HCCRg^{2+} (Rg = Ar and Kr) in the reaction of acetylene dications with rare gases. Physical Chemistry Chemical Physics. Roč. 10 (2008) s. 7121-7128.

Pořadové číslo: 4

Název programu: Přístup na CLIO / Access to CLIO

Název projektu: IRMPD measurements at the European multuser facility CLIO

Koordinátor/řešitel (česky): Dr. P. Maitre / Dr. D. Schröder

Koordinátor/řešitel (anglicky): Dr. P. Maitre / Dr. D. Schröder

Význačný výsledek: Infrared spectra of mass-selected, gaseous ions

Uplatnění/Citace: Milko, P. - Roithová, J. - Schröder, D. Lemaire, J. - Schwarz, H. - Holthausen, M. C.: The Phenoxy/Phenol/Copper Cation: A Minimalistic Model of Bonding Relations in Active Centers of Mononuclear Copper Enzymes. Chemistry - A European Journal. Roč. 14 (2008) s. 4318-4327.

Milko, P. - Roithová, J. - Tsierkezos, N. - Schröder, D.: The C-O stretch as an unprecedentedly large spectral marker for the electron transfer between copper(II) and a phenolate anion. The Journal of the American Chemical Society. Roč. 130 (2008) s. 7186-7187.

Pořadové číslo: 5

Název programu: Přístup na SOLEIL / Access to SOLEIL

Název projektu: Measurements at the European multuser synchrotron facility SOLEIL

Koordinátor/řešitel (česky): Dr. L. Nahon / Dr. D. Schröder

Koordinátor/řešitel (anglicky): Dr. L. Nahon / Dr. D. Schröder

Význačný výsledek: Photoionization with synchrotron radiation

Uplatnění/Citace: C. L. Ricketts, D. Schröder, C. Alcaraz, J. Roithová J.: Growth of larger hydrocarbon ions in the ionosphere of Titan. Chemistry - A European Journal. Roč. 14 (2008) s. 4779-4783.

Schröder, D.: Photoionization for benchmark studies in transition-metal catalysis. Materials Structure. Roč. 15 (2008) s. k52-k54.

Milko, P. - Roithová, J. - Perlík, O. - Schröder, D.: DESIRS a SOLEIL - Stanovení ionizačních energií. Materials Structure. Roč. 15 (2008) s. k55-k56.

Pořadové číslo: 6

Název programu: neformální mezinárodní spolupráce

Název projektu: Ověření kvantově-chemických výpočtů experimenty v plynné fázi

Koordinátor/řešitel (česky): prof. P. Hobza/prof. A.G. de Vries

Koordinátor/řešitel (anglicky): prof. P. Hobza/prof. A.G. de Vries

Význačný výsledek: Spektroskopie tripeptidu GFA v plynné fázi poskytuje energetické a termodynamické údaje, které jsou významné pro srovnání s kvantově-chemickými výpočty

Uplatnění/Citace: Valdes, H. - Spiwok, V. - Řezáč, J. - Reha, D. - Abo-Riziq, A. G. - de Vries, M. S. - Hobza, P.: Potential-energy and free-energy surfaces of glycyl-phenylalanyl-alanine (GFA) tripeptide: Experiment and theory. Chemistry - A European Journal. Roč. 14, č. 16 (2008), s. 4886-4898.

Pořadové číslo: 7

Název programu: neformální mezinárodní spolupráce

Název projektu: Slabé mezimolekulární interakce/Week intermolecular interactions

Koordinátor/řešitel (česky): prof. P. Hobza/ prof. K. Müller-Dethlefs

Koordinátor/řešitel (anglicky): prof. P. Hobza/ prof. K. Müller-Dethlefs

Význačný výsledek: Experimentální a teoretické studie komplexu fenol...Ar potvrdily strukturu tohoto komplexu.

Uplatnění/Citace: Černý, J. - Tong, X. - Hobza, P. - Müller-Dethlefs, K.: State of the art theoretical study and comparison to experiment for the phenol-argon complex. Journal of Chemical Physics. Roč. 128, č. 11 (2008), 114319/1-114319/6.

Pořadové číslo: 8

Název programu: AV ČR – CNRS

Název projektu: Nové elektrolytové systémy pro vysokoúčinné separace peptidů a bílkovin kapilární a čipovou elektroforézou

Koordinátor/řešitel (česky): Dr. Václav Kašička, ÚOCHB AV ČR, v.v.i., Praha / Dr. Gabriel Peltre, ESPCI, Paříž

Koordinátor/řešitel (anglicky): Dr. Václav Kašička, IOCB ASCR, v.v.i., Prague / Dr. Gabriel Peltre, ESPCI, Paris

Význačný výsledek: Kapilární elektroforéza s nosnými amfolyty jakožto základními elektrolyty byla vyvinuta jako vhodná alternativa ke kapilární zónové elektroforéze s klasickými pufrovanými základními elektrolyty pro separaci homologní série hmyzích oostatických peptidů, diastereomerů fosfinátových pseudopeptidů a peptidů uvolňujících gonadotropiny.

Uplatnění/Citace: Koval, D. - Busnel, J.-M. - Hlaváček, J. - Jiráček, J. - Kašička, V. - Petre, G.: Evaluation of carrier ampholyte-based capillary electrophoresis for separation of peptides and peptide mimetics. Electrophoresis. Roč. 29, č. 18 (2008), s. 3759-3767.

Šolínová, V. - Poitevin, M. - Barth, T. - Peltre, G. - Kašička, V.: Comparison of separations of gonadotropin-releasing hormones by capillary electrophoresis in classical and carrier ampholytes-based background electrolytes. 16th Int. Symp. on Capillary Electro-separation Techniques, ITP 2008 – sborník abstrakt, Catania, Italy, 2008. s. 103-103.

Pořadové číslo: 9

Název programu: AV ČR – CSIC

Název projektu: Tlaková kapalinová extrakce kombinovaná s kapilární elektroforézou s hmotnostně spektrometrickou detekcí a jejich využití pro rychlou proteomickou analýzu transgenních plodin.

Koordinátor/řešitel (česky): Dr. Václav Kašička, ÚOCHB AV ČR, v.v.i.; Praha / Dr. Elena Ibañez, Ústav průmyslových fermentací, CSIC, Madrid

Koordinátor/řešitel (anglicky): Dr. Václav Kašička, IOCB ASCR, v.v.i., Prague / Dr. Elena Ibañez, Inst. of Industrial Fermentations, CSIC, Madrid

Význačný výsledek: Byly vyvinuty nové metody pro extrakci ve vodě rozpustných bílkovin z kukuřičné mouky z transgenních a netransgenních odrůd kukuřice a pro analýzu těchto extraktů kapilární zónovou elektroforézou (CZE). Byly nalezeny významné kvalitativní a kvantitativní rozdíly v profilech CZE analýz extraktů bílkovin z transgenních a netransgenních odrůd kukuřice.

Uplatnění/Citace: Sázelová, P. - Kašička, V. - Ibañez, E. - Cifuentes, A.: Extraction and separation of water soluble proteins from Bt transgenic and non-transgenic maize species by capillary zone electrophoresis. 16th Int. Symp. on Capillary Electroseparation Techniques, ITP 2008 - sborník abstrakt, Catania, Italy, 2008. s. 95–95.

Pořadové číslo: 10

Název programu: 4th Framework Program of the European Commission, INCO-Copernicus

Název projektu: Automatický imunoanalytický systém pro kontrolu bezpečnosti ovzduší a jeho využití pro sledování vzdušných alergenů a zamoření ovzduší.

Koordinátor/řešitel (česky): Dr. Gabriel Peltre, ESPCI, Paříž / Dr. Václav Kašička, ÚOCHB AV ČR, v.v.i., Praha

Koordinátor/řešitel (anglicky): Dr. Gabriel Peltre, ESPCI, Paris / Dr. Václav Kašička, IOCB ASCR, Prague

Význačný výsledek: Metodou vysokoučinné kapalinové chromatografie s fluorescenční detekcí byly stanoveny koncentrace polycyklických aromatických uhlovodíků (PAH) v extraktech ze vzdušných částic odebraných v různých ročních obdobích. Výskyt nízké- a vysokomolekulárních PAH se výrazně lišil v závislosti na sezónních změnách prostředí.

Uplatnění/Citace: Bacskay, I. - Góra, R. - Szabó, Z. - Kiss, I. - Kašička, V. - Petre, G. - Kilár, F.: Seasonal variations of polycyclic aromatic hydrocarbons in air particulate extracts. Chromatographia, Roč. 68, Spec. č. (2008), s. S113-S117.

Pořadové číslo: 11

Název programu: neformální spolupráce

Název projektu: Metodologie pro dvojdimenzionální kapilární elektroforézu.

Koordinátor/řešitel (česky): Prof. Hervé Cottet, Univ. Montpellier 1, 2 / Dr. Dušan Koval, ÚOCHB AV ČR, Praha
Koordinátor/řešitel (anglicky): Prof. Hervé Cottet, Univ. Montpellier 1, 2 / Dr. Dušan Koval, IOCB ASCR, Prague
Význačný výsledek: Výběrová dvojdimenzionální kapilární elektroforéza v jedné kapiláře byla využita pro analýzu derivatizovaných aminokyselin. Prvním krokem tohoto přístupu byla preseparace vzorku kapilární zónovou elektroforézou; poté byla pouze vybraná část analytů separovaná v prvním směru přenesena do druhého rozměru, ve kterém byly derivatizované aminokyseliny rozděleny micelární elektrokinetickou chromatografií.
Uplatnění/Citace: Anouti, S. – Vandenaabeele-Trambouze, O. - Koval, D. - Cottet, H.: Heart-cutting two-dimensional capillary electrophoresis for the on-line purification and separation of derivatized amino acids. Analytical Chemistry. Roč. 80, č. 5 (2008), s. 1730-1736.

4c) akce s mezinárodní účastí, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spoluorganizátor

1 Číslo	2 Název akce v češtině	3 Název akce v angličtině	4 Hlavní pořadatel akce česky/anglicky	5 Počet účastníků celkem/z toho z ciziny	6 Významná prezentace
1	14. Symposium chemie složek nukleových kyselin	XIV Symposium on Chemistry of Nucleic Acid Components	ÚOCHB, Michal Hocek	160/140	
2	Konference o sbalování částic retrovirů	Retrovirus assembly meeting (RAM)	ČBMB, ÚOCHB, VŠCHT/Czech Society for Biochemistry and Molecular Biology, IOCB, ICB	70/45	Účast špičkových světových kapacit z oboru
3	Mezinárodní podzimní škola „Biomolekuly: Fyzikální principy a mechanismy“	International fall school „Biomolecules: Physical principles and mechanisms.“	ÚOCHB/IOCB	35/20	
4	Kurz pokročilé metody proteinové krystalizace	Advance Methods In Protein Crystallization	Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích/ University of South	54/40	spoluorganizátor

1 Číslo	2 Název akce v češtině	3 Název akce v angličtině	4 Hlavní pořadatel akce česky/anglicky	5 Počet účastníků celkem/z toho z ciziny	6 Významná prezentace
			Bohemia České Budějovice		

4d) výčet jmen nejvýznamnějších zahraničních vědců, kteří navštívili pracoviště AV ČR

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
	Zvané přednášky:			
1	Prof. Wolfgang LUBITZ	Bioanorganická chemie	MPI for Bioanorganic Chemistry, Mülheim	Germany
2	Prof. Stephen L. BUCHWALD	Katalýza transičními kovy	MIT, Cambridge, Massachusetts	USA
3	Prof. Paul KNOCHEL	Organometalická katalýza v organické syntéze	Ludwig-Maximilians-University, Munich	Germany
4	Prof. Eric T. KOOL	Struktura a funkce DNA	Stanford University, Stanford, California	USA
5	Prof. Albert PADWA	Kaskádové reakce v syntéze alkaloidů	Emory University, Atlanta, Georgia	USA
6	Prof. Dieter SEEBACH	Chemický a biologický výzkum peptidů	ETH, Zurich	Switzerland
7	Prof. Wes BORDEN	Efekty geminálního fluoru na organické reakce	University of North Texas, Denton, Texas	USA
8	Prof. Jay S. SIEGEL	Aromatické sloučeniny jako prekurzor nanomateriálů	Zürich University, Zürich	Switzerland
9	Prof. Alois FÜRSTNER	Katalýza v totální syntéze	MPI für Kohlenforschung, Mülheim	Germany
10	Prof. Marcel MAYOR	Molekuly: funkční jednotky v nanorozměru	University of Basel, Basel	Switzerland
11	Prof. Shu KOBAYASHI	Nové dimenze v acidobasické katalýze	University of Tokyo, Tokyo	Japan
12	Prof. Steven V. LEY	Historie azadirachtinu	University of Cambridge,	UK

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
			Cambridge	
	Ostatní přednášky:			
13	Dr. Jacek Lubkowski	Strukturní biologie	National Cancer Institute	USA
14	Dr. David Waugh	Rekombinantní exprese proteinů	National Cancer Institute	USA
15	Prof. Maria Luisa Sá e Melo	Profesor farmaceutické fakulty	University of Coimbra,	Portugal
16	Dr. Cristina Suñol	Vedoucí pracovník v neurochemii	CSIC Barcelona	Spain
17	Dr. Jordi Bujons	Expert na molekulární modelování	CSIC Barcelona	Spain
18	Prof. Antonio Togni	Asymetrická katalýza, organometalická chemie	ETH Zürich	Switzerland
19	Prof. John Price	Fyzika	University of Colorado, Boulder	USA
20	Prof. Pierre Rasmont	biolog, autorita v oboru taxonomie včelovitého hmyzu	Université Mons-Hainaut, Mons	Belgium
21	Prof. Ruth Ruffino do Nascimento	Associate professor at UFAL (chemistry) - permanent position Instituto de Química e Biotecnologia/IQB/UFAL	University of Alagoes	Brazil
22	Prof. Yves Roisin	významná autorita v biologii termitů	Université Libre de Bruxelles	Belgium
23	Prof. Daniel Griffith	Organická syntéza	Technische Universität Braunschweig/Columbia University	Germany/USA
24	Prof. Norbert Miller	Speciální NMR spektroskopie	University of Linz	Austria
25	Prof. Yoshiyuki Tanaka	DNA enzyme studies	Tohoku University Aobayama	Japan
26	Prof. Stephen D. Price	Coincidence methods / physical chemistry	University College London	UK
27	Dr. Klaus Muller-Dethlefs		Photon Science Institute, University of Manchester	UK
28	Dr. Wiktor Zierkiewicz		University of Wroclaw	Poland
29	Prof. Victoria Buch	fyzikální chemie	Hebrew University Jerusalem	Israel
30	Prof. Kim Collins	biochemie	University of Maryland	USA
31	Prof. Steven Neshyba	fyzikální chemie	University of Pudget Sound	USA
32	Dr. Gabriel Peltre	zakladatel Francouzské elektroforetické	Ecole Supérieure de Physique et	France

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
		společnosti	Chimie Industrielles (ESPCI), Paris	

4e) aktuální meziústavní dvoustranné dohody

1 Číslo	2 Spolupracující instituce	3 Stát	4 Oblast (téma) spolupráce
1	Gilead Sciences, Inc.	USA	Vývoj nových virostatik a cytostatik
2	Instituto de Investigaciones Biomédicas de Barcelona (IIBB)	Španělsko	Neurosteroidy
3	Institute of Chemical and Environmental Research, CSIC	Španělsko	Molekulové modelování
4	Universidad de Buenos Aires, FCEN, DQO	Argentina	Neurosteroidy
5	North Carolina State University, Department of Chemical and Biochemical Engineering, Raleigh	USA	Vyzkum a syntéza funkčních polymeru a polymerních materiálů
6	Ruder Boskovich Institute	Chorvatsko	Protonation of cations
7	Universités Aix-Marseille I, II et III	Francie	Copper complexes of biomolecules
8	Eötvös Loránd University	Maďarsko	New diatomic dications
9	Max Planck Institute for Physics of Complex Systems Dresden	SRN	Mezinárodní postgraduální škola

Seznam citací k oddílu 1b), 2a) a 3b)

1. Bambuch, V. - Pohl, R. - Hocek, M.: Synthesis of 6-(4,5-dihydrofuran-2-yl)- and 6-(tetrahydrofuran-2-yl)purine bases and nucleosides. European Journal of Organic Chemistry. -, č. 16 (2008), s. 2783-2788.

2. Bárta, J. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Ernsting, N. P. - Hocek, M.: Modular synthesis of 5-substituted thiophen-2-yl C-2'-deoxyribonucleosides. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 73, č. 10 (2008), s. 3798-3806.
3. Bobula, T. - Hudlický, J. - Novák, P. - Gyepes, R. - Císařová, I. - Štěpnička, P. - Kotora, M.: Mo-catalyzed cross-metathesis reaction of propynylferrocene. *European Journal of Inorganic Chemistry*. -, č. 25 (2008), s. 3911-3920.
4. Cahová, H. - Havran, L. - Brázdilová, P. - Pivoňková, H. - Pohl, R. - Fojta, M. - Hocek, M.: Aminophenyl- and nitrophenyl-labeled nucleoside triphosphates. Synthesis, enzymatic incorporation and electrochemical detection. *Angewandte Chemie. International Edition in English*. Roč. 47, č. 11 (2008), s. 2059-2062.
5. Cahová, H. - Pohl, R. - Bednářová, L. - Nováková, K. - Cvačka, J. - Hocek, M.: Synthesis of 8-bromo-, 8-methyl- and 8-phenyl-dATP and their polymerase incorporation to DNA. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 6, č. 20 (2008), s. 3657-3660.
6. Čerňa, I. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: Synthesis of 6,8,9-tri- and 2,6,8,9-tetrasubstituted purines by a combination of the Suzuki cross-coupling, N-arylation and direct C-H arylation reactions. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 73, č. 22 (2008), s. 9048-9054.
7. Eignerová, B. - Kotora, M.: Cross-metathese 3-perfluoralkyl)propenů s termálními alkeny. *Chemické listy*. Roč. 102, č. 5 (2008), s. 371-371.
8. Eignerová, B. - Dračínský, M. - Kotora, M.: Perfluoroalkylation through Cross-metathesis between Alkenes and (Perfluoroalkyl)propenes. *European Journal of Organic Chemistry*. -, č. 26 (2008), s. 4493-4499.
9. Hari, Y. - Hwang, G. T. - Leconte, A. M. - Joubert, N. - Hocek, M. - Romesberg, F. E.: Optimization of the pyridyl nucleobase scaffold for polymerase recognition and unnatural base pair replication. *Chembiochem*. Roč. 9, č. 17 (2008), s. 2796-2799.
10. Hasník, Z. - Šilhár, P. - Hocek, M.: Hydroxymethylations of aryl halides by Pd-catalyzed cross-couplings with (benzoyloxy)methylzinc iodide - the scope and limitations of the reaction. *Synlett*. -, č. 4 (2008), s. 543-546.
11. Herrmann, P. - Buděšínský, M. - Kotora, M.: Formal Total Synthesis of (±)-Estrone and Zirconocene-Promoted Cyclization of 2-Fluoro-1,7-octadienes and Ru-Catalyzed Ring Closing metathesis. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 73, č. 16 (2008), s. 6202-6206.
12. Hocek, M. - Fojta, M.: Cross-coupling reactions of nucleoside triphosphates followed by polymerase incorporation. Construction and applications of base-functionalized nucleic acids. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 6, č. 13 (2008), s. 2233-2241.
13. Hrdina, R. - Dračínský, M. - Valterová, I. - Hodačová, J. - Císařová, I. - Kotora, M.: New pathway to C2-symmetric atropisomeric bipyridine N,N'-dioxides and solvent effect in enantioselective allylation of aldehydes. *Advanced Synthesis & Catalysis*. Roč. 350, - (2008), s. 1449-1456.
14. Janková, Š. - Dračínský, M. - Císařová, I. - Kotora, M.: Synthesis and Rearrangement of Dewar Benzenes Into Biaryls: Experimental Evidence for Conrotatory Ring Opening. *European Journal of Organic Chemistry*. -, č. 1 (2008), 47-51.
15. Joubert, N. - Urban, M. - Pohl, R. - Hocek, M.: Modular synthesis of 4-aryl- and 4-amino-substituted benzene C-2'-deoxyribonucleosides. *Synthesis*. -, č. 12 (2008), s. 1918-1932.
16. Kuchař, M. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: Synthesis of diverse 6-(1,2-disubstituted ethyl)purine bases and nucleosides via 6-(oxiran-2-yl)purines. *Tetrahedron*. Roč. 64, č. 45 (2008), s. 10355-10364.

17. Kuchař, M. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Votruba, I. - Hocek, M.: Synthesis of substituted 6-cyclopropylpurine bases and nucleosides by cross-coupling reactions or cyclopropanations. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 6, č. 13 (2008), s. 2377-2387.
18. Kuchař, M. - Hocek, M. - Pohl, R. - Votruba, I. - Shih, I. - Mabery, E. - Mackman, R.: Synthesis, cytostatic and antiviral activity of novel 6-[2-(dialkylamino)ethyl]-, 6-(2-alkoxyethyl)-, 6-[2-(alkylsulfanyl)ethyl]- and 6-[2-(dialkylamino)vinyl]purine nucleosides. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. Roč. 16, č. 3 (2008), s. 1400-1424.
19. Malkov, A. V. - Westwater, M. M. - Gutnov, A. - Ramírez-Lopéz, P. - Friscourt, F. - Kadlčíková, A. - Hodačová, J. - Rankovic, Z. - Kotora, M. - Kočovský, P.: New pyridine N-oxides as chiral organocatalysts in the asymmetric allylation of aromatic aldehydes. *Tetrahedron*. Roč. 64, č. 49 (2008), s. 11335-11348.
20. Malkov, A. V. - Ramírez-Lopéz, P. - Bendová, L. - Rulíšek, L. - Dufková, L. - Kotora, M. - Zhu, F. - Kočovský, P.: On the mechanism of asymmetric allylation of aldehydes with allyltrichlorosilanes catalyzed by QUINOX, a chiral isoquinoline N-oxide. *Journal of the American Chemical Society*. Roč. 130, č. 15 (2008), s. 5341-5348.
21. Nauš, P. - Kuchař, M. - Hocek, M.: Cytostatic and Antiviral 6-Arylpurine Ribonucleosides IX: Synthesis and Evaluation of 6-Substituted 3-Deazapurine Ribonucleosides. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Roč. 73, č. 5 (2008), s. 665-678.
22. Nečas, D. - Kotora, M.: Ring opening of methylenecycloalkenes via the C-C bond cleavage. *Organic Letters*. Roč. 10, č. 22 (2008), s. 5261-5263.
23. Novák, P. - Číhalová, S. - Otmar, M. - Hocek, M. - Kotora, M.: Co- and homocyclotrimerization reactions of protected 1-alkynyl-2-deoxyribofuranose. Synthesis of C-nucleosides, C-di- and C-trisaccharide analogues. *Tetrahedron*. Roč. 64, č. 22 (2008), s. 5200-5207.
24. Novák, P. ; Pour, M. ; Špulák, M. ; Votruba, Ivan ; Kotora, Martin. Extension of the Library of Biological Active gamma-Alkylidene Butenolides. *Synthesis*. -, č. 21 (2008), s. 3465-3472.
25. Srnec, M. ; Chalupský, J. ; Fojta, M. ; Zendlová, L. ; Havran, L. ; Hocek, M. ; Kývala, M. ; Rulíšek, L.: Effect of spin-orbit coupling on reduction potentials of octahedral ruthenium (II/III) and osmium (II/III) complexes. *Journal of the American Chemical Society*. Roč. 130, č. 33 (2008), s. 10947-10954.
26. Šilhár, P. - Hocek, M. - Pohl, R. - Votruba, I. - Shih, I. - Mabery, E. - Mackman, R.: Synthesis, cytostatic and anti-HCV activity of 6-(N-substituted aminomethyl)-, 6-(O-substituted hydroxymethyl)- and 6-(S-substituted sulfanylmethyl)purine nucleosides. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. Roč. 16, č. 5 (2008), s. 2329-2366.
27. Štefko, M. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: A Modular Methodology for the Synthesis of 4- and 3- Substituted Benzene and Aniline C-Ribonucleosides. *European Journal of Organic Chemistry*. -, č. 10 (2008), s. 1689-1704.
28. Turek, P. - Hocek, M. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Kotora, M.: Cobalt induced synthesis of 6-(pyridin-2-yl)purines by microwave enhanced [2+2+2]-cyclootrimerization. *European Journal of Organic Chemistry*. -, č. 19 (2008), s. 3335-3343.
29. Vrábel, M. - Pohl, R. - Votruba, I. - Sajadi, M. - Kovalenko, S. A. - Ernsting, N. P. - Hocek, M.: Synthesis and photophysical properties of 7-deaza-2'-deoxyadenosines bearing bipyridine ligands and their Ru(II)-complexes in position 7. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 6, č. 16 (2008), s. 2852-2860.

30. Žáková, L. - Kazdová, L. - Hančlová, I. - Protivínská, E. - Šanda, M. - Buděšínský, M. - Jiráček, J.: Insulin Analogues with modifications at position B26. Divergence of binding affinity and biological activity. *Biochemistry*. Roč. 47, č. 21 (2008), s. 5858-5868.
31. Vydra, J. - Selicharová, I. - Smutná, K. - Šanda, M. - Matoušková, E. - Buršíková, E. - Prchalová, M. - Velenská, Z. - Coufal, D. - Jiráček, J.: Two-dimensional electrophoretic comparison of metastatic and non-metastatic human breast tumors using in vitro cultured epithelial cells derived from the cancer tissues. *BMC Cancer*. Roč. 8, (2008), s. 107-119.
32. Maletínská, L. - Maixnerová, J. - Matyšková, R. - Haugvicová, R. - Pírník, Z. - Kiss, A. - Železná, B.: Synergistic effect of CART (cocaine- and amphetamine-regulated transcript) peptide and cholecystokinin on food intake regulation in lean mice. *BMC Neuroscience*. Roč. 9, (2008), s. 1-10
33. Schinkmanová, M. – Votruba, I. – Shibata, R. – Han, B. – Liu, X. – Cihlar, T. – Holý, A.: Human N6-Methyl-AMP/dAMP aminohydrolase (abacavir 5'-monophosphate deaminase) is capable of metabolizing N6-substituted purine acyclic nucleoside phosphonates. *Collect. Czech. Chem. Commun.* Roč. 73, č. 2 (2008) 275-291.
34. Hájek, M. – Votruba, I. - Holý A. – Krečmerová, M. – Tloušťová, E.: Alpha anomer of 5-aza-2'-deoxycytidine down-regulates hTERT mRNA expression in human leukemia HL-60 cells. *Biochem. Pharmacol.* Roč. 75, č. 4 (2008), s. 965 – 972.
35. Naesens, L. – Andrej, G. – Votruba, I. – Krečmerová, M. – Holý, A. – Neyts, J. – DeClercq, E. – Snoeck, R.: Intracellular metabolism of the new antiviral compound, 1-(S)-[3-hydroxy-2-(phosphonomethoxy)propyl]-5-azacytosine. *Biochem. Pharmacol.* Roč. 76, č.8 (2008), s. 997-1005.
36. Dračínský, M. – Krečmerová, M. – Holý, A.: Study of chemical stability of antivirally active 5-azacytosine acyclic nucleoside phosphonates using NMR spectroscopy. *Bioorg. & Med. Chem.* Roč. 16, č. 14 (2008), s. 6778-6782.
37. Pomeisl, K. – Holý, A. – Votruba, I. – Pohl, R.: Syntheses of N3-substituted thymine acyclic nucleoside phosphonates and a comparison of their inhibitory effect towards thymidine phosphorylase. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* Roč. 18, č. 4 (2008), s. 1364-1367.
38. Renders, M. – Lievrouw, R. – Krečmerová, M. – Holý, A. – Herdewijn, P.: Enzymatic polymerization of phosphonate nucleosides. *ChemBioChem* Roč. 9, č. 17 (2008), s. 2883-2888.
39. Hřebabecký, H. - Dračínský, M. - Holý, A.: Synthesis of novel carbocyclic nucleoside analogues containing bicyclo[2.2.1]hept-2-ene-2-methanol. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications* Roč. 73, č. 1 (2008), s. 44-58.
40. Hřebabecký, H. - Dračínský, M. - De Palma A. M. - Neyts J. - Holý, A.: Synthesis of Novel Racemic Carbocyclic Nucleoside Analogues Derived from 4,8-Dioxatricyclo[4.2.1.0^{3,7}]nonane-9-methanol and 4-Oxatricyclo[4.3.1.0^{3,7}]decane-10-methanol, Compounds with Activity Against Coxsackie Viruses. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, přijato do tisku.
41. Hřebabecký, H. - Dračínský, M. - De Palma A. M. - Neyts J. - Holý, A.: Synthesis of Novel Carbocyclic Nucleoside Analogues Derived from 7-Oxabicyclo[2.2.1]heptane-2-methanol. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, přijato do tisku.
42. Doláková, P. – Dračínský, M. Fanfrlík, J. – Holý, A.: Synthesis of Analogues of Acyclic Nucleoside Diphosphates Containing Phosphonomethylphosphinyl Moiety and Studies of Their Phosphorylation Reaction. *Eur. J. Org. Chem.*, přijato do tisku.

43. Doláková P.; Dračínský M.; Masojídková M.; Šolínová V.; Kašička V.; Holý A.: Synthesis and Properties of Chiral Open-Ring Acyclic Nucleoside Bisphosphonates. *Eur. J. Med. Chem.*, přijato do tisku.
44. Vávrová, K. - Lorencová, K. - Klimentová, J. - Novotný, J. - Holý, A. - Hrabálek, A.: Transdermal and dermal delivery of adefovir: Effects of pH and permeation enhancers. *Eur. J. Pharm. Biopharm.* Roč. 69, č.2 (2008), s. 597-604.
45. Vávrová, K. - Lorencová, K. - Novotný, J. - Holý, A. - Hrabálek, A.: Permeation enhancer dodecyl 6-(dimethylamino)hexanoate increases transdermal and topical delivery of adefovir: Influence of pH, ion-pairing and skin species. *Eur. J. Pharm. Biopharm.* Roč. 70, č. 3 (2008), s. 901-907.
46. Otová, B. – Hrdý, J. – Votruba, I. – Holý, A.: In Vivo Modulation of Angiogenic Genes Expression by Acyclic Nucleoside Phosphonates PMEDAP and PMEG. *Anticancer Res.* Zasláno k publikaci.
47. Votruba, I. – Otová, B. – Holý, A.: Acyklické nukleosidfosfonáty jako potenciální antineoplastika. *Čas.Lék. čes.*, Roč.147, č. 9 (2008), s. 471-477.
48. Pačes, O. - Točík, Z. - Rosenberg, I.: A New Linker For Solid-Phase Synthesis Of Oligonucleotides With Terminal Phosphate Group. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications.* Roč. 73, č. 1 (2008), s. 32-43.
49. Vaněk, V. – Buděšínský, M. – Rinnová, M. – Rosenberg, I.: Prolinol-based nucleoside phosphonic acids: New isosteric conformationally flexible nucleotide analogues. *Tetrahedron.* Roč. v tisku (2008), s. 1-15, DOI: 10.1016/JTet.2008.11.035.
50. Kříž, M. – Němeček, D. – Turpin, P.Y. – Rosenberg, I. – Štěpánek, J.: Structural effects of internucleotide linkage modification at mismatch site in DNA/RNA duplex: Raman study. *Vibrational Spectroscopy.* Roč. 48, č. 1 (2008), s. 148-152.
51. Macek, P. - Žídek, L. - Rumlová, M. - Pichová, I. - Sklenář, V.: ¹H, ¹³C, and ¹⁵N resonance assignment of the N-terminal domain of Mason-Pfizer monkey virus capsid protein, CA 1-140, *Biomolecular NMR Assignments.* Roč. 2, č. 1 (2008), s. 43-45.
52. Matoušková, P. - Luxová, A. - Matoušková, J. - Jiroš, P. - Svatoš, A. - Valterová, I. - Pichová, I.: A delta9 desaturase from *Bombus lucorum* males: Investigation of the biosynthetic pathway of marking pheromones, *Chembiochem.* Roč. 9, č. 15 (2008), s. 2534-2541.
53. Vlach, J. - Lipov, J. - Rumlová, M. - Veverka, V. - Lang, J. - Srb, P. - Knejzlík, Z. - Pichová, I. - Hunter, E. - Hrabal, J. - Ruml, T.: D-retrovirus morphogenetic switch driven by the targeting signal accessibility to Tctex-1 of dynein. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America.* Roč. 105, č. 30 (2008), s. 10565-10570.
54. Wildová, M. - Hadravová, R. - Štokrová, J. - Křížová, I. - Ruml, T. - Hunter, E. - Pichová, I. - Rumlová, M.: The effect of point mutations within the N-terminal domain of Mason-Pfizer monkey virus capsid protein on virus core assembly and infectivity. *Virology.* Roč. 380, č. 1 (2008), s. 157-163.
55. Hrušková, O.: Secreted proteins of *Candida albicans*. *Frontiers in Bioscience.* Roč. 13, č. 18 (2008), s. 7227-7242.
56. Bujdáková, H. – Paulovicová, E. - Borecká-Melkusová, S. – Gasperík, J. – Kucharíková, S – Kolecka, A. – Lell, C. – Jensen, D. B. – Würzner, R. – Chorvát, D. Jr. – Pichová, I.: Antibody response to the 45 kDa *Candida albicans* antigen in an animal model and potential role of the antigen in adherence. *J Med Microbiol.*, v tisku
57. Snášel, J. – Rosenberg, I. – Pačes, O. – Pichová, I.: The strand transfer oligonucleotide inhibitors of HIV-integrase. *Virology* . 2008

58. Vaisocherová, H. – Snášel, J. – Springer, T. - Sípová, H. - Rosenberg, I. – Stěpánek, J. – Homola, J.: Surface plasmon resonance study on HIV-1 integrase strand transfer activity. *Anal Bioanal Chem.*, v tisku
59. Zábranský, A. – Hadravová, R. – Štokrová, J. – Sakalian, M. – Pichová, I.: Premature processing of mouse mammary tumor virus Gag polyprotein impairs intracellular capsid assembly. *Virology*, v tisku
60. Kohoutová, Z. - Rumlová, M. - Andreánský, M. - Sakalian, M. - Pichová, I. - Ruml, T.: The impact of altered polyprotein ratios on the assembly and infectivity of Mason-Pfizer monkey virus. *Virology*, in press.
61. Kožíšek, M. - Grantz Šašková, K. - Řezáčová, P. - Brynda, J. - Maarseveen van, N. M. - De Jongh, D. - Boucher, Ch. A. B. - Kagan, R. M. - Nijhuis, M. - Konvalinka, J.: Ninety-nine is not enough: molecular characterization of inhibitor-resistant human immunodeficiency virus type 1 protease mutants with insertions in the flap region. *Journal of Virology*. Roč. 82, č. 12 (2008), s. 5869-5878.
62. Kožíšek, M. - Cígler, P. - Lepšík, M. - Fanfrlík, J. - Řezáčová, P. - Brynda, J. - Pokorná, J. - Plešek, J. - Grüner, B. - Grantz Šašková, K. - Prejdová, J. - Král, V. - Konvalinka, J.: Inorganic polyhedral metallacarborane inhibitors of HIV protease: a new approach to overcoming antiviral resistance. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 51, č. 15 (2008), s. 4839-4843.
63. Bařinka, C. - Hlouchová, K. - Rovenská, M. - Majer, P. - Dauter, M. - Hin, N. - Ko, Y. S. - Tsukamoto, T. - Slusher, B. S. - Konvalinka, J. - Lubkowski, J.: Structural basis of interactions between human glutamate carboxypeptidase II and its substrate analogs. *Journal of Molecular Biology*. Roč. 376, č. 5 (2008), s. 1438-1450.
64. Grantz Šašková, K. - Kožíšek, M. - Lepšík, M. - Brynda, J. - Řezáčová, P. - Kagan, R. M. - Machala, L. - Konvalinka, J.: Enzymatic and structural analysis of the I47A mutation contributing to the reduced susceptibility to HIV protease inhibitor lopinavir. *Protein Science*. Roč. 17, č. 9 (2008), s. 1555-1564.
65. Bartoňová, V. - Král, V. - Siegllová, I. - Brynda, J. - Fábry, M. - Hořejší, M. - Kožíšek, M. - Grantz Šašková, K. - Konvalinka, J. - Sedláček, J. - Řezáčová, P.: Potent inhibition of drug-resistant HIV protease variants by monoclonal antibodies. *Antiviral Research*. Roč. 78, č. 3 (2008), s. 275-277.
66. Carozzi, V. A. - Canta, A. - Oggioni, N. - Ceresa, C. - Marmioli, P. - Konvalinka, J. - Zoia, Ch. - Bossi, M. - Ferrarese, C. - Tredici, G. - Cavaletti, G.: Expression and distribution of 'high affinity' glutamate transporters GLT1, GLAST, EAAC and of GCP II in the rat peripheral nervous system. *Journal of Anatomy*. Roč. 213, - (2008), s. 539-546.
67. Cígler, P. - Král, V. - Kožíšek, M. - Konvalinka, J. - Mirsky, V.M.: Anomalous adsorptive properties of HIV protease: Indication of two-dimensional crystallization? *Colloids and Surfaces B-Biointerfaces*. Roč. 64, č. 1 (2008), s. 145-149.
68. Rovenská, M. - Hlouchová, K. - Šácha, P. - Mlčochová, P. - Horák, V. - Zámečník, J. - Bařinka, C. - Konvalinka, J.: Tissue expression and enzymologic characterization of human prostate specific membrane antigen and its rat and pig orthologs. *Prostate*. Roč. 68, - (2008), s. 171-182.
69. Sojka, D. - Franta, Z. - Horn, M. - Hajdušek, O. - Caffrey, CR - Mareš, M. - Kopáček, P.: Profiling of proteolytic enzymes in the gut of the tick *Ixodes ricinus* reveals an evolutionarily conserved network of aspartic and cysteine peptidases. *Parasites & Vectors*. Roč. 1, č. 7 (2008), s. 1-14.

70. Slavíková, B. - Kohout, L. - Buděšínský, M. - Swaczynová, J. - Kasal, A. Brassinosteroids: synthesis and activity of some fluoro analogues. *J. Med. Chem.* Roč. 51, č. 13 (2008), s. 3979-3984.
71. Slavíková, B. - Kasal, A. - Kohout, L. - Buděšínský, M. - Swaczynová, J. 5-Fluor-3 α ,17 β -dihydroxy-5 α -pregnan-6-on, způsob jeho výroby a jeho použití. *PV 2008-183* (20.3.2008).
72. Kvasnica, M. – Buděšínský, M. Swaczynova, - J. Pouzar, V. – Kohout, L. Platinum(II) complexes with steroidal esters of l-methionine and l-histidine: Synthesis, characterization and cytotoxic activity. *Bioorg. Med. Chem.* Roč.16, č 7 (2008), s. 3704-3713.
73. Kvasnica, M. – Rudovská, I. – Císařová, I. – Šarek, J. Reaction of lupane and oleanane triterpenoids with Lawesson's reagent *Tetrahedron* Roč. 64, č 17 (2008), s. 3736-3743.
74. Černý, I. - Šťastná, E. - Pouzar, V. - Chodounská, H.: Selectivity in reductions of 7-ketosteroids with sodium borohydride. *Chemické listy*. Roč. 102, č. 11 (2008), s. 1030.
75. Černý, I.: Analoga cholesterolu s florescenční značkou. *Imunoanalýza 2008*. Lubochňa : Národní endokrinologický a diabetologický ústav, 2008. S. 7.
76. Kříž, L. - Bičíková, M. - Mohapl, M. - Hill, M. - Černý, I. - Hampl, R.: Steroid sulfatase and sulfuryl transferase activities in human brain tumors. *Journal of Steroid Biochemistry and Molecular Biology*. Roč. 109, č. 1 (2008), s. 31-39
77. Míšek, J. - Teplý, F. - Stará, I. G. - Tichý, M. - Šaman, D. - Císařová, I. - Vojtíšek, P. - Starý, I.: A Straightforward Route to Helically Chiral N-Heteroaromatic Compounds: Practical Synthesis of Racemic 1,14-Diaza[5]helicene and Optically Pure 1- and 2-Aza[6]helicenes. *Angewandte Chemie. International Edition in English*. Roč. 47, č. 17 (2008), s. 3188-3191.
78. Sehnal, P. - Krausová, Z. - Teplý, F. - Stará, I. G. - Starý, I. - Rulíšek, L. - Šaman, D. - Císařová, I.: On the Origin of Diastereoselectivity in [2 + 2 + 2] Cycloisomerization of Chiral Triynes: Controlling Helicity of Helicene-like Compounds by Thermodynamic Factors. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 73, č. 6 (2008), s. 2074-2082.
79. Kumprecht, L. - Buděšínský, M. - Vondrášek, J. - Vymětal J. - Černý J. - Císařová I. - Brynda J. - Herzig V. - Koutník P. - Závada J. - Kraus T.: Rigid Duplex α -Cyclodextrin Reversibly Connected With Disulfide Bonds. Synthesis and Inclusion Complexes. *The Journal of Organic Chemistry*, ACS, v tisku.
80. Vacek, J. - Caskey, D.C. - Horinek, D. - Shoemaker, R.K. - Stang, P.J. – Michl J.: Pyridine Ligand Rotation in Self-Assembled Trigonal Prisms. Evidence for Intra-Cage Solvent Vapor Bubbles? *J. Am. Chem. Soc.*, Roč. 130, č.24 (2008), s. 7629-7638.
81. Caskey, D.C. - Yamamoto, T. - Addicott, C. - Shoemaker, R.K. - Vacek, J. - Hawkrige, A.M. - Muddiman, D.C. - Kottas, G.S. - Michl, J. – Stang P.J.: Coordination-Driven Face-Directed Self-Assembly of Trigonal Prisms. Face-Based Conformational Chirality. *J. Am. Chem. Soc.*, Roč. 130, č.24 (2008), s. 7620-7628.
82. Adriaenssens, L. – Severa, L. – Šalová, T. – Císařová, I. – Pohl, R. – Šaman, D. – Rocha, S. V. – Finney, N. S. – Pospíšil, L. Slavíček, P. – Teplý, F.: Helquats: A Facile, Modular, Scalable Route to Novel Helical Dications. [Helquat: snadná, modulární a robustní syntéza nových helikálních dikationů.] *Chemistry - A European Journal*. (2008), DOI: 10.1002/chem.200801904, v tisku.

83. Adriaenssens, L. – Severa, L. – Šálová, T. – Pohl, R. – Šaman, D. – Císařová, I. – Pospíšil, L. – Slavíček, P. – Teplý, F.: Helquat: snadná příprava unikátního helikálního dikationtu. [Helquat: facile synthesis of unique helical dication.] *Chemické listy*. Roč. 102, č. 5 (2008), s. 398-398.
84. Míšek, J. – Teplý, F. – Stará, I. G. – Tichý, M. – Šaman, D. – Císařová, I. – Vojtíšek, P. – Starý, I.: A Straightforward route to helically chiral N-heteroaromatic compounds: practical synthesis of racemic 1,14-diaza[5]helicene and optically pure 1- and 2-aza[6]helicenes. [Přímocará příprava helikálně chirálních N-heteroaromatických sloučenin: syntéza racemického 1.14-diaza[5]helicenu a opticky čistých 1- and 2-aza[6]helicenů.] *Angewandte Chemie. International Edition in English*. Roč. 47, č. 17 (2008), s. 3188-3191.
85. Sehnal, P. – Krausová, Z. – Teplý, F. – Stará, I. G. – Starý, I. – Rulíšek, L. – Šaman, D. – Císařová, I.: On the origin of diastereoselectivity in [2+2+2] cycloisomerization of chiral triynes: Controlling helicity of helicene-like compounds by thermodynamic factors. [O původu diastereoselektivity při [2+2+2] cykloisomerizaci chirálních triynů: Kontrola helicity u helicenu podobných látek pomocí termodynamických faktorů.] *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 73, č. 6 (2008), s. 2074-2082.
86. Malkov, A. V. – Stewart-Liddon, A. J. P. – Teplý, F. – Kobr, L. – Muir, K. W. – Haigh, D. – Kočovský, P.: New pinene-derived pyridines as bidentate chiral ligands. [Nové bidentátní chirální ligandy odvozené od pinenu.] *Tetrahedron*. Roč. 64, č. 18 (2008), s. 4011-4025.
87. Beier P. – Alexandrova A. V. – Zibinsky M. – Prakash G. K. S.: Nucleophilic difluoromethylation and difluoromethylenation of aldehydes and ketones using diethyl difluoromethylphosphonate.: *Tetrahedron*. Roč. 64, č. 49 (2008), s. 10977–10985.
88. Babiak P. – Němcová A. – Rulíšek L. – Beier P.: On the miscibility of ethers and perfluorocarbons. An experimental and theoretical study.: *Journal of Fluorine Chemistry*. Roč. 129, č. 5 (2008), s. 397–401.
89. Cabirol, F. L. - Lim, A. E. C. - Hanefeld, U. - Sheldon, R. A. - Lyapkalo, Ilya: Robust and efficient, yet uncatalysed synthesis of trialkylsilyl-protected cyanohydrins from ketones. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 73, č. 6 (2008), s. 2446-2449.
90. Čeřovský, V. – Hovorka, O. – Cvačka, J. – Voburka, Z. – Bednářová, L. – Borovičková, L. – Slaninová, J. – Fučík, V.: Melectin: A novel antimicrobial peptide from the venom of the cleptoparasitic bee *Melecta albifrons*. *Chembiochem*. Roč. 9, č. 17 (2008), s. 2815-2821.
91. Čeřovský, V. – Slaninová, J. – Fučík, V. – Hulačová, H. - Borovičková, L. - Ježek, R. - Bednářová, L.: New potent antimicrobial peptides from the venom of Polistinae wasps and their analogs. *Peptides*. Roč. 29, č. 6 (2008), s. 992-1003.
92. Šobotník, J. - Kalinová, B. - Cahlíková, L. - Weyda, F. - Ptáček, V. - Valterová, I.: Age-dependent changes in structure and function of the male labial gland in *Bombus terrestris*. *Journal of Insect Physiology*. Roč. 54, č. 2 (2008), s. 204-214.
93. Urbanová, K. - Cahlíková, L. - Hovorka, O. - Ptáček, V. - Valterová, I.: Age-dependent changes in the chemistry of exocrine glands of *Bombus terrestris* queens. *Journal of Chemical Ecology*. Roč. 34, č. 4 (2008), s. 458-466.
94. Matoušková, P. - Luxová, A. - Matoušková, J. - Jiroš, P. - Svatoš, A. - Valterová, I. - Pichová, I. A delta9 desaturase from *Bombus lucorum* males: Investigation of the biosynthetic pathway of marking pheromones. *Chembiochem*. Roč. 9, č. 15 (2008), s. 2534-2541.

95. Cvačka, J. - Kofroňová, E. - Vašíčková, S. - Stránský, K. - Jiroš, P. - Hovorka, O. - Kindl, J. - Valterová, I.: Unusual fatty acids in the fat body of the early nesting bumblebee, *Bombus pratorum*. *Lipids*. Roč. 43, č. 5 (2008), s. 441-450.
96. Šobotník, J. - Hanus, R. - Kalinová, B. - Piskorski, R. - Cvačka, J. - Bourguignon, T. - Roisin, Y.: (E,E)-alpha-Farnesene, an alarm pheromone of the termite *Prorethra termites canalifrons*. *Journal of Chemical Ecology*. Roč. 34, č. 4 (2008), s. 478-486.
97. Šobotník, J. - Hanus, R. - Roisin, Y.: Agonistic behavior of the termite *Prorethra termites canalifrons* (Isoptera: Rhinotermitidae). *Journal of Insect Behavior*. Roč. 21, č. 6 (2008), s. 521-534.
98. Hlavsova, K. - Wimmer, Z. - Xanthakis, E. - Bernášek, P. - Sovová, H. - Zarevúcka, M.: Lipase activity enhancement by SC-CO₂ treatment. *Zeitschrift fur Naturforschung Section B - A Journal of Chemical Sciences*. Roč. 63, č. 6 (2008), s. 779-784.
99. Sovová, H. - Zarevúcka, M. - Bernášek, P. - Stamenič, M.: Kinetics and Specificity of Lipozyme-Catalysed Oil Hydrolysis in Supercritical CO₂. *Chemical Engineering Research and Design*. Roč. 86, č. 7 (2008), s. 673-681.
100. Kokoška, L. - Havlík, J. - Valterová, I. - Sovová, H. - Sajfrtová, M. - Jankovská, I.: Comparison of chemical composition and antibacterial activity of *Nigella sativa* seed essential oils obtained by different extraction methods. *Journal of Food Protection*. Roč. 71, č. 12, (2008), s. 2475-2480.
101. Hrdina, R. - Dračínský, M. - Valterová, I. - Hodačová, J. - Císařová, I. - Katora, M.: New pathway to C2-symmetric atropisomeric bipyridine N,N'-dioxides and solvent effect in enantioselective allylation of aldehydes. *Advanced Synthesis & Catalysis*. Roč. 350, č. 10 (2008), s. 1449-1456.
102. Tykva, R. - Černý, B. - Wimmer, Z. - Hanus, R.: Distribution of a juvenogen and its metabolites in a laboratory system during juvenogen-induced caste differentiation in a termite, *Reticulitermes santonensis* (Isoptera: Rhinotermitidae). *Pest Management Science*. Roč. 64, č. 6 (2008), s. 654-659.
103. Šobotník, J. - Kudlíková-Křížková, I. - Vancová, M. - Münzbergová, Z. - Hubert, J.: Chitin in the peritrophic membrane of *Acarus siro* (Acari: Acaridae) as a target for novel acaricides. *Journal of Economic Entomology*. Roč. 101, č. 3 (2008), s. 1028-1033.
104. Jahn, U., Galano, J.M., Durand, T., *Angew. Chem. Int. Ed.*, Roč. 47 (2008), s.5894-5955.
105. Rezek, J. – in der Wiesche, C. - Macková, M. – Zadražil, F. – Macek, T.: The effect of ryegrass (*Lolium perenne*) on decrease of PAH content in long term contaminated soil. *Chemosphere*, Roč. 70 (2008), s. 1603-1608.
106. Rezek, J. - Macek, T. - Macková, M. - Tříška, J. - Růžičková, K.: Hydroxy-PCBs, methoxy-PCBs and hydroxy-methoxy-PCBs: Metabolites of polychlorinated biphenyls formed in vitro by tobacco cells, *Environ. Sci. Technol.*, Roč. 42 (2008), s. 5746-5751.
107. Uhlík, O. – Ječná, K. – Macková, M. – Leigh, M.B. – Demnerová, K. – Macek, T.: Stable isotope probing as a tool for the detection of active microorganisms in xenobiotics degradation. *Chem Listy*, Roč. 102 (2008), s. 474-479.
108. Diopan, V. - Shestivska, V. – Adam, V. – Macek, T. – Macková, M. – Havel, L. – Kizek, R.: Determination of content of metallothioneins and low molecular mass stress peptides in transgenic tobacco plants. *Plant Cell Tissue Org. Cult.*, Roč. 94 (2008), s. 291-298.

109. Macek, T. – Kotrba, P. – Svatoš, A. – Demnerová, K. – Nováková, M. – Macková, M.: Novel roles for GM plants in environmental protection. *Trends Biotechnol.*, Roč. 26 (2008), s. 146-152.
110. Uhlík, O. – Kamlar, M. – Kohout, L. – Ježek, R. – Harmatha, J. – Macek, T.: Affinity chromatography reveals RuBisCO as an ecdysteroid-binding protein. *Steroids*, Roč. 73 (2008), s. 1433–1440.
111. Uhlík, O. – Ječná, K. – Leigh, M.B. – Macková, M. - Macek, T.: DNA-based stable isotope probing: a link between community structure and function. *Sci Total Environ* (2008). Epub ahead of print, doi:10.1016/j.scitotenv.2008.05.012.
112. Rezek, J. - in der Wiesche, C. - Macková, M. - Zadražil, F. – Macek, T.: Biodegradation of PAHs in long-term contaminated soil cultivated with european white birch (*Betula pendula*) and red mulberry (*Morus rubra*) tree, *Int. J. Phytoremediat.*, Roč. 11 (2009), s. 1-16.
113. Nováková, M. – Macková, M. – Chrastilová, Z. – Viktorová, J. – Szekeres, M. – Demnerová, K. – Macek, T.: Cloning of bacterial bphC gene into *Nicotiana tabacum* to improve the efficiency of PCB phytoremediation. *Biotechnol. Bioeng.*, Roč. 102 (2009), s. 29-37.
114. Macek, T. – Uhlík, O. – Kamlar, M. – Harmatha, J. – Kohout, L.: Způsob zvýšení výtěžku fotosyntetické asimilace oxidu uhličitého. Český patent č. 299886, zveřejněno 17. 12. 2008
115. Macek, T. – Uhlík, O. – Kamlar, M. – Harmatha, J. – Kohout, L.: Method of increasing of the photosynthetic carbon dioxide assimilation yield. EU patent PCT/CZ2008/000044, zveřejněno 23. 10. 2008, WO 2008/125069
116. Buděšínský, M.- Daněček, P.- Bednárová, L.- Kapitán, J.- Baumruk, V.- Bouř, P.: Comparison of Quantitative Conformer Analyses by Nuclear Magnetic Resonance and Raman Optical Activity Spectra for Model Dipeptides. *J. Phys. Chem. A*, Roč. 112 (2008), s. 8633-8640.
117. Buděšínský, M.- Šebestík, J.- Bednárová, L.- Baumruk, V.- Šafařík, M.- Bouř, P.: Conformational Properties of the Pro-Gly Motif in the D-Ala-L-Pro-Gly-D-Ala Model Peptide Explored by a Statistical Analysis of the NMR, Raman, and Raman Optical Activity Spektra. *J. Org. Chem.* Roč. 73, č.4 (2008), s. 1481-1489..
118. Andrushchenko, V.-Bouř, P.: Circular Dichroism Enhancement in Large DNA Aggregates Simulated by a Generalized Oscillator Model. *J. Comput. Chem.* Roč. 29, č.16 (2008), s. 2693-2703.
119. Sychrovský, V. - Benda, L. - Prokop, A. - Blechta, V. - Schraml, J. - Špirko, V.: Probing the flexibility of internal rotation in silylated phenols with the NMR scalar spin-spin coupling constants. *Journal of Physical Chemistry. A*. Roč. 112, č. 23 (2008),s. 5167-5174.
120. Šebek, J. - Bouř, P.: Ab initio modeling of the electronic circular dichroism induced in porphyrin chromophores. *Journal of Physical Chemistry. A*. Roč. 112 (2008), s. 2920-2929.
121. Milko, P. - Roithová, J. - Tsierkezos, N. - Schröder, D.: The C-O stretch as an unprecedentedly large spectral marker for the electron transfer between copper(II) and a phenolate anion. *The Journal of the American Chemical Society*. Roč. 130 (2008) s. 7186-7187.
122. Ascenzi, D. - Tosi, P. - Roithová, J. - Schröder, D.: Gas-phase synthesis of the rare-gas carbene cation ArCH_2^+ using doubly ionised bromomethane as a superelectrophilic reagent. *Chemical Communication*. (2008), s. 4055-4057.
123. Řezáč, J. - Hobza, P.: Benzene dimer: Dynamic structure and thermodynamics derived from on-the-fly ab initio DFT-D molecular dynamic simulations. *Journal of Chemical Theory and Computation*. Roč. 4, č. 11 (2008), s. 1835-1840.

124. Šponer, J. - Riley, K.E. - Hobza, P.: Nature and magnitude of aromatic stacking of nucleic acid bases. *Physical Chemistry Chemical Physics*. Roč. 10, č. 19 (2008), s. 2595-2610.
125. Nachtigallová, D. - Hobza, P. - Ritze, H. H.: Electronic splitting in the excited states of DNA base homodimers and -trimers: an evaluation of short-range and Coulombic interactions. *Physical Chemistry Chemical Physics*. Roč. 10, č. 37 (2008), s. 5689-5697.
126. Lund, M. - Vrbka, L. - Jungwirth, P.: Specific ion binding to nonpolar surface patches of proteins. *Journal of the American Chemical Society*. Roč. 130, č. 35 (2008), s. 11582-11583.
127. Lund, M. - Jungwirth, P. - Woodward, C. E.: Ion specific protein assembly and hydrophobic surface forces. *Physical Review Letters*. Roč. 100, - (2008), , 258105-1-258105-4.
128. Lund, M. - Vácha, R. - Jungwirth, P.: Specific ion binding to macromolecules: Effects of hydrophobicity and ion pairing. *Langmuir*. Roč. 24, č. 7 (2008), s. 3387-3391.
129. Slavíček, P. - Winter, B. - Faubel, M. - Bradforth, S. E. - Jungwirth, P.: Ionization energies of aqueous pyrimidine components of nucleic acids by photoelectron spectroscopy and ab initio calculations. Submitted to *Journal of the American Chemical Society*.
130. Babiak, P. - Němcová, A. - Rulíšek, L. - Beier, P. On the miscibility of ethers and perfluorocarbons. An experimental and theoretical study. *Journal of Fluorine Chemistry*. Roč. 129, č. 5 (2008), s. 397-401.
131. Banáš, P. - Rulíšek, L. - Hánošová, V. - Svozil, D. - Walter, N.G. - Šponer, J. - Otyepka, M.: General base catalysis for cleavage by the active-site cytosine of the hepatitis delta virus ribozyme: QM/MM calculations establish chemical feasibility. *Journal of Physical Chemistry B*. Roč. 112, č. 35 (2008), s. 11177-11187.
132. Fanfrlík, J. - Brynda, J. - Řezáč, J. - Hobza, P. - Lepšík, M.: Interpretation of protein/ligand crystal structure using QM/MM calculations: Case of HIV-1 protease/metallacarborane complex. *Journal of Physical Chemistry B*. Roč. 112, č. 47 (2008), s. 15094-15102.
133. Grantz Šašková, K. - Kožíšek, M. - Lepšík, M. - Brynda, J. - Řezáčová, P. - Kagan, R. M. - Machala, L. - Konvalinka, J.: Enzymatic and structural analysis of the I47A mutation contributing to the reduced susceptibility to HIV protease inhibitor lopinavir. *Protein Science*. Roč. 17, č. 9 (2008), s. 1555-1564.
134. Kožíšek, M. - Cígler, P. - Lepšík, M. - Fanfrlík, J. - Řezáčová, P. - Brynda, J. - Pokorná, J. - Plešek, J. - Grüner, B. - Grantz Šašková, K. - Prejdová, J. - Král, V. - Konvalinka, J.: Inorganic polyhedral metallacarborane inhibitors of HIV protease: a new approach to overcoming antiviral resistance. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 51, č. 15 (2008), s. 4839-4843.
135. Kožíšek, M. - Svatoš, A. - Buděšínský, M. - Muck, A. - Bauer, M. C. - Kotrba, P. - Ruml, T. - Havlas, Z. - Linse, S. - Rulíšek, L.: Molecular design of specific metal-binding peptide sequences from protein fragments: Theory and Experiment. *Chemistry - A European Journal*. Roč. 14, č. 26 (2008), s. 7836-7846.
136. Král, V. - Mader, P. - Collard, R. - Fábry, M. - Hořejší, M. - Řezáčová, P. - Kožíšek, M. - Závada, J. - Sedláček, J. - Rulíšek, L. - Brynda, J.: Stabilization of antibody structure upon association to a human carbonic anhydrase IX epitope studied by X-ray

- crystallography, microcalorimetry, and molecular dynamics simulations. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics*. Roč. 71, č. 3 (2008), s. 1275-1287.
137. Malkov, A. V. - Ramírez-Lopéz, P. - Bendová, L. - Rulíšek, L. - Dufková, L. - Katora, M. - Zhu, F. - Kočovský, P.: On the mechanism of asymmetric allylation of aldehydes with allyltrichlorosilanes catalyzed by QUINOX, a chiral isoquinoline N-oxide. *Journal of the American Chemical Society*. Roč. 130, č. 15 (2008), s. 5341-5348.
138. Ončák, M. - Srnec, M.: Electronic structure and physical properties of MiXi clusters (M = B, Al; X = N, P; i=1, 2, 3): Ab initio study. *Journal of Computational Chemistry*. Roč. 29, č. 2 (2008), s. 233-246.
139. Sehnal, P. - Krausová, Z. - Teplý, F. - Stará, I. - Starý, I. - Rulíšek, L. - Šaman, D. - Císařová, I.: On the origin of diastereoselectivity in [2+2+2] cycloisomerization of chiral triynes: Controlling helicity of helicene-like compounds by thermodynamic factors. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 73, č. 6 (2008), s. 2074-2082.
140. Srnec, M. - Chalupský, J. - Rulíšek, L.: Are octahedral ruthenium (II/III) and osmium (II/III) complexes always low-spin?. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Roč. 73, č. 10 (2008), s. 1231-1244.
141. Srnec, M. - Chalupský, J. - Fojta, M. - Zendlová, L. - Havran, L. - Hocek, M. - Kývala, M. - Rulíšek, L.: Effect of spin-orbit coupling on reduction potentials of octahedral ruthenium (II/III) and osmium (II/III) complexes. *Journal of the American Chemical Society*. Roč. 130, č. 33 (2008), s. 10947-10954.
142. Srnec, M. - Ončák, M. - Zahradník, R.: Reaction mechanism of oxidation, hydroxylation, and epoxidation by hypofluorous acid: A theoretical study of unusual H-bond-assisted catalysis. *Journal of Physical Chemistry. A*. Roč. 112, č. 6 (2008), s. 3631-3637.
143. Valdes, H. - Klusák, V. - Pitoňák, M. - Exner, O. - Starý, I. - Hobza, P. - Rulíšek, L.: Evaluation of the intramolecular basis set superposition error in the calculations of larger molecules: [n]helicenes and Phe -Gly-Phe tripeptide. *Journal of Computational Chemistry*. Roč. 29, č. 6 (2008), s. 861-870.
144. Ehala, S. - Míšek, J. - Stará, I.G. - Starý, I. - Kašička, V.: Determination of acid-base dissociation constants of azahelicenes by capillary zone electrophoresis. *Journal of Separation Sciences*. Roč. 31, č. 14 (2008), s. 2686-2693.
145. Ehala, S. - Míšek, J. - Stará, I.G. - Starý, I. - Kašička, V.: Determination of acid-base dissociation constants of azahelicenes by capillary electrophoresis. 16th Int. Symp. on Capillary Electroseparation Techniques, ITP 2008 – sborník abstrakt, Catania, Italy, 2008. s. 89.
146. Koval, D. - Busnel, J.-M. - Hlaváček, J. - Jiráček, J. - Kašička, V. - Petre, G.: Evaluation of carrier ampholyte-based capillary electrophoresis for separation of peptides and peptide mimetics. *Electrophoresis*. Roč. 29, č. 18 (2008), s. 3759-3767.
147. Šolínová, V. - Poitevin, M. - Barth, T. - Peltre, G. - Kašička, V.: Comparison of separations of gonadotropin-releasing hormones by capillary electrophoresis in classical and carrier ampholytes-based background electrolytes. 16th Int. Symp. on Capillary Electroseparation Techniques, ITP 2008 – sborník abstrakt, Catania, Italy, 2008. s. 103 -103.
148. Ehala, S. - Kašička, V. - Makrlík, E.: Determination of binding constants of valinomycin complexes with ammonium and alkali metal ions by capillary affinity electrophoresis. *Electrophoresis*. Roč. 29, č. 3 (2008), s. 652-657.

149. Dybal, J. - Ehala, S. - Kašička, V. - Makrlík, E.: Theoretical and experimental study of the complexation of valinomycin with ammonium cation., *Biopolymers*. Roč. 89, č. 12 (2008), s. 1055-1060.
150. Kašička, V. - Ehala, S. - Šolínová, V. - Schimperková, T. - Sázelová, P. - Makrlík, E.: Investigation of peptide interactions with small ions and cyclodextrins by capillary electrophoresis. 16th Int. Symp. on Capillary Electro-separation Techniques, ITP 2008 – sborník abstrakt, Catania, Italy, 2008. s. 24
151. Řezáčová P., Kožíšek M., Moy S.F., Siegllová I., Joachimiak A., Machius M., Otwinowski Z.: Crystal structures of the effector-binding domain of repressor CggR from *Bacillus subtilis* reveal ligand-induced structural changes upon binding of several glycolytic intermediates. *Mol. Microb.*, Roč 69 (2008), s. 895-910.
152. Chalupský, J. - Vondrášek, J. - Špirko, V.: Quasiplanarity of the peptide bond. *Journal of Physical Chemistry A*. Roč. 112, č. 4 (2008), s. 693-699.
153. Melsa, P. - Čajan, M. - Havlas, Z. - Mazal, C.: Substituent effect on exo stereoselectivity in the 1,3-dipolar cycloaddition reaction of tulipalin A with nitrile ylides. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 73, č. 8 (2008), s. 3032-3039.
154. Bhosekar, G. - Jess, I. - Havlas, Z. - Nather, C.: Structures and properties of three polymorphic modifications based on tetrahedral building blocks of dichlorobis(pyridazine-*n*) Zinc(II). *Crystal Growth & Design*. Roč. 7, č. 12 (2008), s. 2627-2634.
155. Kývala, M.: Calculation of transition matrix elements by nonsingular orbital transformations. *International Journal of Quantum Chemistry*. V tisku.
156. Turský, M. - Veselý, J. - Tišlerová, I. - Trnka, T. - Ledvina, M.: Synthesis of a new type of D-mannosamine glycosyl donor and acceptor and their use for the preparation of oligosaccharides consisting of D-mannosamine units linked by alpha(1->4)-glycosidic bonds. *Synthesis*. č. 16 (2008), s. 2610-2616.
157. Orság, P. - Kvardová, V. - Raška, M. - Miller, A. D. - Ledvina, M. - Turánek, J.: Quantitative real-time PCR study on persistence of pDNA vaccine pVax-Hsp60 TM814 in beef muscles. *Genetic Vaccines and Therapy*. Roč. 6, č. 11 (2008), s. 1-11.
158. Ježek, J. - El Ridi, R. - Salah, M. - Wagih, A. - Aziz, H. W. - Tallima, H. - El Shafie, M. H. - Khalek, T. A. - Ammou, F. F. A. - Strongylis, C. - Moussis, V. - Tsikaris, V.: *Fasciola gigantica* cathepsin L proteinase-based synthetic peptide for immunodiagnosis and prevention of sheep fasciolosis. *Biopolymers*. Roč. 90, č. 3 (2008), s. 349-357.
159. Niederhafner, P. - Šebestík, J. - Ježek, J.: Glycopeptide dendrimers. Part I. *Journal of Peptide Science*. Roč. 14, č. 1 (2008), s. 2-43.
160. Niederhafner, P. - Šebestík, J. - Ježek, J.: Glycopeptide dendrimers. Part II. *Journal of Peptide Science*. Roč. 14, č. 1 (2008), s. 44-65.
161. Niederhafner, P. - Reiniš, M. - Šebestík, J. - Ježek, J.: Glycopeptide dendrimers, Part III – a review: Use of glycopeptide dendrimers in immunotherapy and diagnosis of cancer and viral diseases. *Journal of Peptide Science*. Roč. 14, č. 5 (2008), s. 556-587.
162. Ledvina, M. – Turánek, J. - Miller A.D.: Adjuvants, UK pat. Appl. No. 0804989.2, (2008), s. 1-123.

IV. Hodnocení další a jiné činnosti:

Předmětem jiné činnosti ÚOCHB je provozování nestátního zdravotního zařízení v rozsahu vymezeném rozhodnutím o registraci, a to ordinace praktického lékaře a stomatologické ordinace. Dále výroba, instalace a opravy elektrických a elektronických strojů, přístrojů a zařízení. Rozsah jiné činnosti je 0,98% pracovní kapacity ÚOCHB. Jiná činnost není ztrátová.

Další činnosti ÚOCHB neprovozuje.

V. Informace o opatřeních k odstranění nedostatků v hospodaření a zpráva, jak byla splněna opatření k odstranění nedostatků uložená v předchozím roce:

V roce 2008 bylo na pracovišti provedeno několik kontrol.

1/ V době od 19.3.2008 do 6.6.2008 prováděl Finanční úřad pro Prahu 6 kontrolu podle §16 zákona č. 337/1992 Sb., o správě daní a poplatků, ve znění pozdějších předpisů. Předmětem kontroly bylo hospodaření s prostředky poskytnutými ze státního rozpočtu v rozmezí let 1998 až 2005.

Při kontrole nebyly zjištěny nedostatky, nápravná opatření nebyla uložena.

2/ V době od 26.8. do 3.10.2008 prováděl Finanční úřad pro Prahu 6 kontrolu podle §16 zákona č. 337/1992 Sb., o správě daní a poplatků, ve znění pozdějších předpisů. Předmětem kontroly bylo hospodaření s prostředky poskytnutými ze státního rozpočtu ČR Grantovou agenturou ČR v letech 2006 -2007.

Výsledkem kontroly bylo uložení obvodu do státního rozpočtu ve výši Kč 5000,00 za porušení rozpočtové kázně a penále ve výši Kč 680,00. Částka byla uhrazena a předepsána k náhradě zaměstnanci.

3/ V době od 16. 7. 2008 do 11. 9. 2008 prováděl Finanční úřad pro Prahu 6 na základě ustanovení § 43 zákona č. 337/1992 Sb., o správě daní a poplatků, ve znění pozdějších předpisů, vytykácí řízení ve věci odstranění pochybností v daňovém přiznání k DPH za duben 2008. Ve zprávě je konstatováno, že daňovým subjektem byly odstraněny pochybnosti týkající se nadměrného odpočtu DPH ve výši Kč 1 095 135. Celá částka byla Finančním úřadem uznána a v plné výši vrácena.

4/ V době od 6.10.2008 do 8.10.2008 byla Pražskou správou sociálního zabezpečení provedena kontrola pojistného a plnění úkolů v nemocenském pojištění a důchodovém pojištění ve smyslu ustanovení § 6 odst. 4 písm. o) zákona č. 582/1991 v platném znění. V kontrolovaném období 1.11.2006 - 31.8.2008 nebyly zjištěny žádné nedostatky, nápravná opatření nebyla uložena.

VI. Finanční informace o skutečnostech, které jsou významné z hlediska posouzení hospodářského postavení instituce a mohou mít vliv na její vývoj:*)

Vedle dotací od zřizovatele a finančních prostředků od poskytovatelů grantových prostředků jsou hlavním zdrojem finančních příjmů ústavu licenční poplatky od firmy Gilead Sciences.

Objem finančních zdrojů z licenčních příjmů má (v US\$) stoupající tendenci a tato tendence se podle vyjádření zástupců firmy Gilead očekává i do budoucna.

Finanční situaci pozitivně ovlivní i uznání látky tenofovir pro léčení žloutenky typu B v USA a EU. V různých fázích klinických testů jsou i preparáty proti rakovině, papilomavirum a nový preparát proti HIV. Na všechny tyto látky vlastní ústav základní patenty licencované firmě Gilead Sciences. Při úspěchu testů tyto licence pozitivně ovlivní příjmy ústavu.

Ústav podepsal smlouvu o založení společnosti typu spin-off Okapi Sciences v Belgii, na které získává spoluúčasť za licencování patentu. Společnost se věnuje využití protivirových látek ve veterinární medicíně. Pozitivní ekonomické výsledky se očekávají v horizontu dvou až tří let.

Ústav si nechal vypracovat analýzu komercializačních možností. V současnosti připravuje vytvoření struktury, která se bude věnovat monitorování využití duševního vlastnictví, jeho ochraně a komercializaci. Ekonomické efekty se očekávají v horizontu pěti let.

Ústav připravuje kompletní rekonstrukci a dostavbu areálu Flemingova náměstí v Praze 6. To povede k modernizaci pracoviště na úroveň srovnatelnou s předními pracovišti v zahraničí. Rekonstrukce si vyžádá finanční náklady nad 1 miliardu Kč, hrazené převážně z licenčních příjmů.

VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:*)

Vzhledem k tomu, že evaluace nově vytvořených (počátkem roku 2007) vědeckých a vědecko-servisních týmů je plánována po pěti letech, předpokládaná činnost v tomto pětiletém období je z větší části definována přijatým plánem.

V chemii a biochemii nukleových kyselin budou převážnou měrou pokračovat témata v minulých liniích, k nim přibude ještě výzkum N6-substituovaných enantiomerních FPMP derivátů. Pravděpodobnost výskytu účinných látek v této skupině ANP je vysoká. Je ovšem potřeba si uvědomit, že naprostá většina studia uvedených látek je součástí projektů řešených v Centru nových antivirotik a antineoplastik a odtud i financována, takže podléhá podmínkám pro tato uskupení předepsaným včetně hlášení o výsledcích práce.

V týmu organických syntéz pro biomedicínské aplikace bude pokračovat vývoj metodik syntéz purinových derivátů nesoucích funkcionalizované C-substituenty a studium jejich biologické aktivity. Dále

- bude pokračovat studium modifikovaných purinových nukleosidů jako potenciálních terapeutik hepatitidy C,
- budou připraveny další nukleotidové stavební bloky označené na nukleobázi vhodnou elektrochemicky aktivní značkou a po zabudování do oligonukleotidů budou

*) Údaje požadované dle § 21 zákona 563/1991 Sb., o účetnictví, ve znění pozdějších předpisů.

tyto využity jako potenciální sensory hybridizace DNA, obdobně označené oligonukleotidy budou využity k zakotvení na površích kovu a elektrod a využity pro studium přenosu náboje v DNA,

- budou připraveny nové typy C-nukleosidů nesoucích modifikované nukleobáze, budou připraveny jejich trifosfáty a bude studována jejich enzymatická inkorporace do DNA polymerasami. Výsledky budou využity v racionálním návrhu umělých párů bází pro rozšíření genetické abecedy,
- budou konstruovány funkcionalizované DNA duplexy pomocí PCR inkorporace modifikovaných dNTP.

V týmu biochemie proteinů

Projekty byly zaměřeny především na studium inhibitorů virové proteasy HIV a vývoje resistance vůči nim u pacientů s AIDS, na charakterizaci glutamátcarboxypeptidasy II a jejich homologů a orthologů jako cíle terapeutického zásahu při onemocněních CNS a v onkologii, na studium struktury a aktivity serinové racemasy z myšího a lidského mozku.

- Bude strukturně charakterisována rekombinantní lidská GCPII i její homolog GCPIII v komplexu se specifickými inhibitory. Budou připraveny monoklonální protilátky proti těmto enzymům a charakterisována jejich exprese v lidských i zvířecích tkáních.
- Bude provedena strukturně-funkční studie C-terminální domény retrovirové proteasy, která ovlivňuje skládání a infektivitu opičích viru. Budou identifikovány buněčné proteiny, které s touto doménou interagují.
- Bude provedena strukturně funkční analýza matrixového proteinu opičích viru.
- Bude dokončeno řešení NMR struktury N-terminální domény kapsidového proteinu MPMV.
- Bude analyzován sekreční mechanismus u patogenních kvasinek rodu *Candida*.

V chemii steroidů

V oblasti neurosteroidů: budou připraveny nové typy neuroaktivních steroidů se zlepšenou metabolickou stabilitou a s dostatečnou rozpustností ve vodě. Testování bude prováděno jak v Praze tak v rámci společného projektu na IIBB v Barceloně.

- V oblasti brassinosteroidů: budou pokračovat syntézy nových brassinosteroidů navržených na základě molekulového modelování, jako jsou například konjugáty s aminokyselinami a alfa-hydroxykyselinami, fluorované brassinosteroidy a dále jak přírodní tak nové syntetické brassinosteroidy s modifikovaným postranním skeletem jako regulátory fyziologických procesů u rostlin pěstovaných v optimálních a stresových podmínkách.
- V oblasti supresterooidů bude hlavní pozornost věnována oligoTB systémům se steroidní substitucí a selektivní epoxidací steroidních olefinů a syntetizovány další synthony pro konstrukce supramolekul.

V oblasti přírodních látek

- Bude pokračovat studium biosyntézy feromonů čmeláků v labiální žláze s cílem rozhodnout mezi možnostmi biosyntézy *de novo* a možností participace zásobních tuků jako přímých prekursorů, bude studováno rozšíření čmeláků v ČR za pomoci chemotaxonomických i genetických technik s cílem sledování biodiversity a jejich změn. Ve spolupráci s ČLR bude pokračovat projekt "Studium chemické komunikace zavíječe *Euzophera batangensis*", který je v současnosti přemnoženým škůdcem na jujubě, nejvýznamnější ovocné dřevině v sv. Číně. Syntetický sexuální feromon bude zkoušen jako návnada do signalizačních a monitorovacích lapáků, případně i jako prostředek pro hubení.
- Bude studována chemická komunikace u termitů druhu *Prorhinotermes simplex* a typy signálů, které se uplatňují mezi kastami v kolonii termitů.

- Bude pokračovat výzkum chemické ekologie hrobaříků (Coleoptera, Silphidae) s ohledem na jejich potravní atraktanty, obranné látky a feromonální komunikaci.
- Bude pokračovat studium peptidických regulátorů metamorfozy, reprodukce a imunity hmyzu, včetně identifikace nových hmyzích peptidů s antimikrobiálními účinky a syntézy analogů.
- Bude pokračovat výzkum enzymových transformací rostlinných olejů v superkritickém oxidu uhličitém v rámci národních (GACR) i mezinárodních (COST) projektů.

Spolupráce v rámci těchto projektů existuje mezi ÚOCHB AV ČR a Ústavem chemických procesů AV ČR a VŠCHT Praha a dále s Portugalskem, Francií a Bulharskem.

V oblasti organické chemie

V dalším období bude pozornost soustředěna na vývoj obecné asymetrické syntézy helicenů a heterohelicenů, aby tyto látky byly dostupné v dostatečném množství v neracemické formě pro další aplikace v asymetrické katalýze a molekulární elektronice.

- Bude vyvíjena metodologie syntézy nejvyšších helicenů a jejich analogů, která bude založena na násobné [2+2+2] cykloisomerizaci aromatických oligoynů. Pozornost bude zaměřena na přípravu funkcionalizovaných helicenů jako modelu molekulárních vodičů.

Výzkum bude dále soustředěn na syntézu isoprenoidů v racemické a neracemické formě za použití nástrojů organometalické chemie a využití [2+2+2] cykloisomerizace pro přípravu funkcionalizovaných arylpurinových nukleotidů a nukleosidů.

- V oblasti studia komponent pro molekulární elektroniku bude zahájena syntéza potenciálně vodivých oligomerních derivátů umožňujících selektivní interakce s partnerským řetězcem na bázi donor-akceptorových - interakcí. V rámci řešení grantového projektu (GA AV) budou syntetizovány stavební bloky pro konstrukci ligandů pro fullerény.

- Dále bude pokračovat syntéza rigidních chirálních spirobifluorenových derivátů. Z makrocyclických polyaminů, vzniklých (3+3) cyklokondenzační reakcí, bude výzkum soustředěn hlavně na studium komplexačních vlastností produktů reakcí rigidních dialdehydů s heterocyklickými jádry. V chemii funkcionalizovaných cyklodextrinů se plánuje extenze úspěšných postupů na deriváty pro přípravu rozměrnějších molekulárních kontejnerů.

V oblasti biologické chemie

- Budou pokračovat syntézy knihoven dalších typů fosfonátových oligoadenylátů – analogů přirozeného pA4 a bude vyvinuta FRET metoda na high-throughput screening látek s cílem detailní strukturně-aktivitní studie s lidskou a myší RNAsou L. Vybrané oligoadenyláty budou podrobeny biologickým testům.

- Budou studovány interakce heptaoligodeoxynukleotidů s CpG motivem modifikovaných v internukleotidové vazbě s TL9 receptorem.

- Budou syntetizovány serie antisensních oligonukleotidů a siRNA modifikovaných fosfonátovou internukleotidovou vazbou a bude zkoumán vliv těchto modifikací na biologické vlastnosti ve srovnání s klasickými obdobnými oligonukleotidy.

- Budou vypracovány high-throughput testy na screening potenciálních inhibitorů nukleosidfosforylas a 5'-nukleotidas.

- Budou pokračovat syntézy „small molecules“, strukturně variabilních pyrrolidinových a piperidinových fosfonátových nukleotidů.

- Budou připraveny nové inhibitory lidské BHMT a určeny jejich aktivity in vitro a in vivo.

Budou připraveny nové inhibitory bakteriálních aminopeptidáz 1 a 2 a určeny jejich aktivity in vitro.

- Budou připraveny nové analogy lidského insulinu a určeny jejich aktivity in vitro a in vivo, případně krystalové struktury.

- Budou pokračovat 2DE proteomické studie buněk z normální a rakovinné tkáně prsu.

- Budou pokračovat proteomické studie antimikrobiálních látek larev masařky.

- Budou připraveny nové inhibitory bakteriálních DapE a ArgE enzymů.

- Budou zkoumány účinky biologicky aktivních peptidů (např. CART a cholecystokinin) na příjem potravy u myší.

Ve spolupráci s vybraným komerčním subjektem ustanovit ÚOCHB Spin off pracoviště a v jeho kompetenci zahájit v oblasti vývoje nové skupiny imunoterapeutik na bázi modifikovaných muramylových glykopeptidů etapu jejich preklinického vývoje.

- Pokračování v designu a syntéze polykationických transportních systémů negativně nabitých terapeutik typu modifikovaných nukleotidů a oligonukleotidů a vektoru DNA plasmidu pro genovou terapii. Jedná se o látky typu lipopolyaminů a glykolipidů obsahujících oligosacharidy D-hexosaminového typu.

- Pokračování výzkumu v oblasti syntesy cyklických oligosacharidů tvořených $\beta(1\rightarrow4)$ vázanými 2-amino-2-deoxy-D-hexopyranosovými jednotkami.

- Pokračování výzkumu v oblasti vývoje oligosacharidových mimetik přirozených ligandů aktivačních lektinových receptorů NK na bázi lineárních a větvených homo- a heterooligosacharidů D-hexosaminového typu a od nich odvozených glykokonjugátů.

V oblasti molekulového modelování budou rozvíjeny tyto okruhy aktivit:

- Studium modelových systémů a bazí DNA v elektronicky excitovaných stavech, vývoj hybridních QM/MM metod a aplikace na interakci DNA a proteinu, interakce analogů bazí DNA, struktura a sbalování proteinů, struktura a dynamika peptidů.

- Výpočet termodynamických charakteristik DNA a proteinů s interagujícími systémy, studium energetiky a dynamiky nekanonických párů bazí v DNA a RNA,

- Studium interakce malých molekul s kationtovými centry v komplexních systémech, studium konformačního prostoru nukleových kyselin,

- QM/MM a QM/MD simulace štěpení fosfodiesterové vazby v RNA (ribozomy)

- Segregace iontů na površích a iontové párování

- Afinita iontů k proteinům a k membránám

- Struktura a dynamika solvovaných elektronů

- Studium reakčních mechanismů metaloproteinů

- Molekulový design peptidů vázajících vybrané ionty kovů

Výpočet relativistických efektů u organických biradikalů

Výpočty reaktivity karboranových ylidů

Návrhy struktur materiálů pro fotovoltaické články

- Studium stability párů nukleových kyselin v nevodných prostředích

V oblasti strukturní analýzy:

Budou vyvíjeny nové metody analýzy organických látek s využitím chromatografických separačních technik a hmotnostní spektrometrie. Pozornost bude věnována přírodním látkám lipidického charakteru a látkám s biologickou aktivitou. Bude pokračovat vývoj softwarových nástrojů pro interpretaci MS spekter. Bude pokračovat zavádění technik analýzy proteinů a peptidů, zejména jejich purifikace a kvantifikace. V rámci servisních povinností budou rutinně analyzovány vzorky syntetických i přírodních látek. Standardně budou měřena MS spektra při jednotkovém nebo vysokém rozlišení s využitím EI, ESI, APCI, FAB a MALDI

ionizace. V případě potřeby budou prováděny GC/MS a LC/MS analýzy. Bude prováděna analýza peptidů, proteinů a oligonukleotidů. Bude zřízena laboratoř pro samoobslužná měření na GC/MS.

- Budeme se nadále zabývat řešením základních problémů konformace biopolymerů pomocí chirální spektroskopie (proteiny, peptidy, nukleové kyseliny, sacharidy). V detailu budeme řešit konformaci disulfidových můstků, amidového chromoforu, vlivu prostředí na spektra. Budeme nadále rozvíjet chirální spektroskopii po teoretické i experimentální stránce. Budeme rovněž poskytovat celoustavní servis v oboru CD,IR.

- Určování struktur a prostorového uspořádání biologicky významných přírodních a syntetických látek v roztocích pomocí vícerozměrných NMR technik na novém 600 MHz spektrometru vybaveném kryogenní sondou s vysokou citlivostí a s využitím molekulového modelování.

- Vývoj nových metod pro určení absolutních konfigurací u biologicky významných látek pomocí *in situ* reakcí v NMR kyvetách a teoretických výpočtů chemických posunů a interakčních konstant pomocí *ab initio* metod (modifikované peptidy a nukleotidy). Zavedení měření NMR spekter v pevné fázi. Zefektivnění práce NMR skupiny zavedením nepřetržitého samoobslužného měření NMR spekter na přístroji Bruker AVANCE-400 s automatickým měničem vzorku a naprogramovanými NMR experimenty.

- Bude pokračovat vývoj nového kapilárního elektrokinetického analyzátoru s multidimenzionální detekcí a budou vyvíjeny nové metodiky pro analýzu, preparaci a fyzikálně-chemickou charakterizaci peptidů, bílkovin, nukleotidů, nukleosidů a jiných biomolekul kapilárními a průtokovými elektromigračními metodami ve vodném roztoku.

Ve skupině radioisotopů:

- Bude připraven $[3H]$ methylester kyseliny 10-undecenové pomocí něhož bude studována fotoiniciovaná vazba terminálních alkenů na povrch aktivovaného křemíku (ve spolupráci s MFF UK, Praha).

- Bude připraven ^{125}I značený neuropeptid a ve spolupráci s Institute Demokritos, Řecko, bude studována jeho vazba na buněčné membrány.

VIII. Aktivity v oblasti ochrany životního prostředí: *)

Výzkum na ÚOCHB se dotýká oblasti ochrany životního prostředí pouze okrajově.

IX. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů: *)

V r. 2008 byli v souladu s Kariérním řádem atestováni vysokoškolsky vzdělaní pracovníci ve vědeckých a vědecko-servisních týmech, kteří byli přeřazeni po obhájení disertační práce do vyššího kvalifikačního stupně a pracovníci, kterým v tomto období končila platnost pracovních smluv. S ohledem na výsledky atestací jsou s těmito zaměstnanci uzavřeny pracovní smlouvy na dobu určitou (1 – 5 let). Úsilí vedení ústavu je zaměřeno na rozvoj ústavu a dosažení excelence v oboru. Sledování a hodnocení produktivity a kvality výsledků pracovních týmů i jednotlivců

umožňuje stanovit nejen současný stav, ale i tendenci. Motivační opatření spočívají v individuálním finančním ohodnocení a podpoře nejlepších týmů a jednotlivců i v jejich přístrojovém vybavení a personálním posílení. Nedílnou součástí snah o další zkvalitnění vědecké práce v ústavu je vypsání 10 volných míst ročně v rámci programu „IOCB Postdoctoral Project“. Předpokladem pro přijetí na roční stáž (s možností prodloužení o další rok) je PhD titul získaný v oboru organické chemie či biochemie na zahraniční universitě.

Při přijímání nových výzkumných pracovníků (včetně zahraničních) je kladen důraz především na jejich odbornost a vědeckou úroveň, kterou posuzuje konkurzní komise.



RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.

Razítko

e-mail: havlas@uochb.cas.cz, tel.: 220183333

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE A BIOCHEMIE
AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY, v.v.i.
Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6
DIČ: CZ61388963
-10-

podpis ředitele pracoviště AV ČR

Přílohou výroční zprávy jsou

a) číselná část

b) účetní závěrka a zpráva o jejím auditu