

# **ÚOCHB AV ČR, v. v. i.**

IČ: 61388963

Sídlo: Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

## **Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2009**

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 31.května 2010

Radou pracoviště schválena dne: 4. června 2010

V Praze dne 13. května 2010

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

### a) 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.**

## **b) Změny ve složení orgánů:**

### **Rada pracoviště:**

Dne 26. 2. 2009 odstoupil dr. Havlas podle Čl. 1 odst. 5 jednacího řádu z funkce předsedy Rady ÚOCHB i z členství v radě z důvodu pracovního vytížení ve funkci ředitele ústavu.

V doplňujících volbách byl dne 19. 5. 2009 zvolen členem Rady Mgr. Lubomír Rulíšek, CSc., ÚOCHB AV ČR, v. v. i.

Dne 18. 6. 2009 byl novým předsedou Rady ÚOCHB zvolen doc. RNDr. Jan Konvalinka, CSc., ÚOCHB AV ČR, v. v. i.

### **Dozorčí rada:**

Prof. Jiří Drahoš, DrSc. byl dne 14. 4. 2009 podle § 19 odst. 4 zákona č. 341/2005 Sb. o veřejných výzkumných institucích, a podle čl. 17 přílohy Stanov Akademie věd ČR po zvolení předsedou Akademie věd ČR uvolněn Akademickou radou z funkce člena Dozorčí rady ÚOCHB, v. v. i.

## **c) Informace o činnosti orgánů:**

### **Ředitel:**

V průběhu roku 2009 bylo vydáno 6 vnitřních směrnic, 16 příkazů ředitele a 12 informací vedení. Vzhledem k tomu, že dlouhodobě platné příkazy byly vydány v roce 2007, v tomto roce měly příkazy charakter operativních nařízení. 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 nárůstu produktivity týmů v počtu a kvalitě publikací a citovanosti prací z ústavu.

Významným úkolem je příprava kompletní rekonstrukce a dostavby areálu. Pro budovu B byla podána žádost o stavební povolení. Realizace rekonstrukce nastane nejprve u budovy C v roce 2010 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. Jsou upravovány objekty v Papírenské ulici.

Ústav pořídil přístrojovou techniku v objemu 45 mil. Kč. Nejvýznamnější položky tvoří zařízení pro studium povrchů SPM (scanning probe microscopy) metodami 16,1 mil. Kč, systémy pro kapalinovou chromatografii za 3,9 mil. Kč a výpočetní servery za 2,7 mil. Kč. Z menších položek stojí ještě za zmínku RTG optika Helios (1,9 mil. Kč) a krystalografický robot (1,7 mil. Kč).

V rámci Invited Lecture Series se uskutečnilo na ústavu 14 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 10 zahraničních postdoktorandů. Pokračoval Sabbatical Visiting Program, jehož cílem je rozšířit kontakty pracovníků ústavu, podpořit budoucí

spolupráci a propagovat práci ústavu. V rámci tohoto programu pracoval na ústavu jeden význačný vědec z Rakouska.

Byla založena dceřiná společnost IOCB TTO, která má za úkol poskytovat služby ústavu v oblasti komercializace duševního vlastnictví a tuto činnost organizovat.

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

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

### **Rada pracoviště:**

V roce 2009 se uskutečnilo 11 jednání Rady ÚOCHB AV ČR, v. v. i.

#### 1. Společné zasedání Dozorčí Rady a Rady ÚOCHB AV ČR, v. v. i. – 27. 1. 2009 Účastníci zasedání (dle prezenční listiny, bez titulů):

Dozorčí rada:

Přítomni: Rákosník, Drahoš, Šebo, Šebek

Omluveni: Illnerová, Chalupa, Šaman

Rada ÚOCHB:

Přítomni: Havlas, Kraus, Holý, Buděšinský, Valterová, Moravcová, Sychrová

Hodačová, Konvalinka

Omluveni: -

Hosté: Petschová, Špička, Pichová, Vévoda (fy McKinsey), Králová (fy McKinsey)

Rada Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i. (ÚOCHB) souhlasí se záměrem, aby veřejná výzkumná instituce ÚOCHB založila jinou právnickou osobu IOCB TTO za účelem komercializace duševního vlastnictví ÚOCHB. ÚOCHB bude jediný vlastník IOCB TTO. Právní formou IOCB TTO bude společnost s ručením omezeným. Tento souhlas se vydává s podmínkou souhlasného projednání právních dokumentů k založení IOCB TTO, které radě pracoviště předloží vedení ÚOCHB před založením IOCB TTO.

Dozorčí rada bude hlasovat per rollam o tom, zda souhlasí se záměrem založit IOCB TTO. Další postup:

1. ÚOCHB zajistí přípravu potřebných dokumentů a předloží je Dozorčí radě ke schválení.
2. Dozorčí rada dokumenty projedná za účasti alespoň dvoutřetinového počtu svých členů a v kladném případě vydá souhlas se založením IOCB TTO.
3. Návrh na založení předloží ÚOCHB Akademii věd jako svému zřizovateli.

#### 2. zasedání – 26. 2. 2009

Rada aklamací jednomyslně schvaluje navrženou změnu zřizovací listiny, která byla předem projednána a schválena hlasováním per rollam.

Rada doporučuje znovu oslovit členy AB s cílem informovat je včas o termínu

evaluace (únor 2010), které by se členové AB měli zúčastnit.

Rada schvaluje výběr významných zahraničních vědců pro zvané přednášky.

Osloveni budou: Bast, Breaker, Burrows, Echavarren, Fu, Joachim, Leigh, Milstein, Soai, Solomon, Liebeskid a Willner.

Rada doporučuje a) obnovení inzerátu na obsazení funkce vedoucího technické správy ústavu, b) zvážit možnost oslovení personální agentury, a c) pověřit Ing.

Špičku předložením schematu organizační struktury THS v ÚMG, jako případného modelu pro ÚOCHB.

Rada podrobně diskutovala možnosti získání 16 nových pracovních os pro pracovníky na prestižním grantu prof. Michla a týmy dr. Jahna a dr. Lyapkala. Jako alternativní řešení k návrhu vedení na rekonstrukci 3.p. SB doporučuje provést (v návaznosti na probíhající průběžné hodnocení týmů) audit místností a pracovních os s možností omezení pracovních prostor méně výkonným týmům.

Dr. Havlas odstoupil podle Čl. 1 odst. 5 jednacího řádu z funkce předsedy Rady ÚOCHB i z členství v radě z důvodu pracovního vyčerpání ve funkci ředitele ústavu.

Jménem členů rady mu za úspěšnou činnost ve funkci za uplynulé období poděkoval doc. Konvalinka.

Nové volby do Rady ÚOCHB podle volebního řádu (v rámci koše výpočetní chemie) zorganizuje místopředseda rady dr. Kraus do jednoho měsíce.

### 3. zasedání – 3. 4. 2009

Rada projednala dokumenty týkající se založení společnosti pro transfer technologií IOCB TTO s.r.o. a bere na vědomí, že do těchto dokumentů budou zapracovány připomínky právního oddělení KAV a Dozorčí rady ÚOCHB. Rada souhlasí s tím, aby konečné dokumenty byly schváleny per rollam. Rada doporučuje, aby v dozorčí radě IOCB TTO s.r.o. byli přítomni zástupci zaměstnanců ÚOCHB a členové orgánů ÚOCHB.

Rada bere na vědomí průběžné hodnocení publikační aktivity týmů ÚOCHB a doporučuje zveřejnit konečné verze spolu se všemi podklady na webových stránkách ÚOCHB.

Rada žádá vedení ÚOCHB ve smyslu zápisu ze zasedání 26.2.2009 provést do konce dubna 2009 audit místností náležejících týmům a jejich personálního osazení.

Rada byla seznámena s koncepcí modifikované varianty stavebního programu rekonstrukce a dostavby areálu ÚOCHB, kde

budova B (nová budova v prostoru současného dvora) bude obsahovat laboratoře organické chemie a skladové zázemí

do budovy A („stará budova“) budou přesunuty prostory původně navrhované do budovy B (pracoviště teoretické chemie, knihovna, jídelna, přednáškový sál)

stavební program budovy C zůstává beze změn

budova D zůstane zachována ve stávající podobě pro administrativní účely.

Rada s touto koncepcí souhlasí.

Rada bere na vědomí dopis části zaměstnanců ÚOCHB a děkuje za náměty v něm obsažené. Rada se domnívá, že změna koncepce rekonstrukce ÚOCHB vyhovuje většině návrhů.

Rada navrhuje, aby vedení ÚOCHB vypracovalo statut stávající Metodické rady a rozšířilo její působnost na problematiku rekonstrukce ÚOCHB včetně zajištění její účasti na klíčových jednáních s projektanty.

Rada doporučuje rozdělení současné THS na ekonomickou a technicko-správní část,

včetně vytvoření a obsazení příslušné vedoucí pozice nově vzniklého technicko-správního útvaru přímo podřízené řediteli ÚOCHB.

Rada schvaluje publikování úplných zápisů ze svých zasedání na vnitřních webových stránkách ÚOCHB.

#### 4. zasedání – 15. 5. 2009

Rada schvaluje upravený rozpočet a skutečnost nákladů a výnosů k 31. 12. 2008, upravený rozpočet a skutečnost kapitálových nákladů k 31. 12. 2008 a upravený rozpočet, tvorbu a čerpání Sociálního fondu k datu 31. 12. 2008, - výsledek hospodaření za rok 2008 a jeho rozdělení do fondů pracoviště takto:

a) Fond reprodukce majetku Kč 80 000 000,00

b) Fond rezervní Kč 374 458 668,76

Rada požaduje před konečným rozhodnutím o počtu podlaží a konstrukčním řešení budovy B podrobnější podklady od dodavatele projektu. Rada k tomuto účelu svolává mimořádné zasedání ve čtvrtek 21.5.2009 v 8.30 s přítomností zástupce projektanta a členů metodické komise.

Rada navrhuje, aby vedení ÚOCHB definovalo základní vybavení laboratoří hrazených z rozpočtu ÚOCHB a stanovilo mechanismus podávání a výběru návrhů na nákup nákladných přístrojů z rozpočtu ÚOCHB.

#### 5. zasedání – mimořádná schůze – 21. 5. 2009

Rada schvaluje výběr varianty návrhu budovy B, ve které budou tři podlaží organických laboratoří, a doporučuje jej vedení ústavu k realizaci.

Rada schvaluje výběr varianty č.4 návrhu dispozičního řešení rekonstrukce budovy A.

#### 6. zasedání – 18. 6. 2009

Novým předsedou Rady ÚOCHB byl zvolen doc. RNDr. Jan Konvalinka, CSc.

Rada schvaluje návrh rozpočtu ÚOCHB na rok 2009.

Rada žádá vedení ÚOCHB o vypracování doplněné verze auditu místností.

Rada vyzývá vedení k zahájení jednání s vedoucími týmů medicínálních steroidů, společné laboratoře ÚOCHB a VŠCHT, přenosu technologií, medicínální chemie a dílen o uvolnění některých méně vytížených pracovních os.

Blahopřeje prof. J. Michlovi a dr. D. Schroederovi k získání prestižních grantů ERC a děkuje jim i dr. J. Rothové a dr. L. Rulíškovi za vzornou reprezentaci ústavu v grantovém systému EU.

#### 7. zasedání – 30. 7. 2009

Rada jednomyslně doporučila nákup EPR spektrometru v hodnotě 10,3 miliónu Kč jehož koupi navrhuje dr. Detlev Schroeder (většinou z prostředků grantu ERC, 4 mil. Kč z prostředků ÚOCHB).

Rada vyjádřila podporu doc. Ledererovi (4 pro, 2 se zdrželi hlasování) a doc. Mudr. Mariánu Hajdúchovi coby kandidátům do předsednictva Technologické agentury ČR (5 hlasů pro).

#### 8. zasedání - 3. 9. 2009

Rada navrhuje řediteli, aby a) v případě zdržení rekonstrukce objektu Papírenská nalezl do 31.12.09 alternativní možnost pro umístění současných uživatelů budovy C a b) bylo zahájeno jednání s realitní kanceláří o využití budovy Canonu pro umístění serverovny.

Rada doporučuje přidělit vhodný kancelářský prostor pro kancelář editora časopisu Journal of Physical Chemistry na ÚOCHB.

Rada žádá ředitele o stanovení termínů a návrh technického provedení evaluace juniorských skupin a týmů dr. Čeřovského, doc. Macka a dr. Chodounské, a to nejpozději do příštího zasedání RI v říjnu t.r. Hodnocení bude spočívat v evaluaci písemných podkladů panelem nezávislých zahraničních odborníků a posouzením jejich doporučení International Advisory Board na jejím zasedání na ÚOCHB.

Konečné rozhodnutí bude přijato do konce února 2010 (5 hlasů pro, 2 členové se zdrželi).

Rada aklamací jednomyslně schvaluje návrh, aby se výjezdní zasedání (konference) ÚOCHB, plánovaná na první polovinu května 2010, programově soustředilo na krátká ústní sdělení mladších vědeckých pracovníků a studentů. Jednotlivým skupinám bude přidělen čas na presentace přibližně podle jejich velikosti.

#### 9. zasedání – 10. 10. 2009

S ohledem na blížící se termín zahájení řady rekonstrukčních prací, Rada navrhuje řediteli, aby urychleně oslovil agenturu pro výběr vedoucího TS.

Rada žádá ředitele, aby připravil stěhování laboratoří z budovy C do budovy A a seznámil s návrhem Radu na zasedání začátkem prosince (3. 12.).

Rada jednomyslně souhlasí s žádostí dr. Voburky o navýšení investičních prostředků na nákup přístroje Biochrom z původně plánovaných 2,8 mil. Kč.

Rada jednomyslně souhlasí s nákupem pojítka sítí mezi budovami ÚOCHB a Canon v ceně 425 tis. Kč.

Rada velice oceňuje práci dr. I. Staré na přípravě a zajišťování akcí IOCB Invited Lecture Series.

#### 10. zasedání – 5. 11. 2009

Rada souhlasí s termínem evaluace týmů za účasti členů Advisory Board stanoveným na 20. – 21. března 2010.

Rada jednomyslně schvaluje návrh aktualizace směrnice Sociální fond.

Rada bere na vědomí, že výjezdní zasedání vědeckých pracovníků ÚOCHB se bude konat ve Frymburku (Lipno, zařízení má kapacitu pro 250 lidí) ve dnech 3. – 6. května 2010. Referáty budou přednášet zejména studenti, doktorandi a postdoktorandi.

#### 11. zasedání – 3. 12. 2009

Rada se zabývala možností přímého nákupu ze zahraničí (bez účasti zprostředkujících firem), který je praktikován v řadě ústavů AV i vysokých škol. Současný postup, tj. nákup věcí pomocí zprostředkovatelských firem, je pro pracovníky ústavu ekonomicky často značně nevýhodný. Rada doporučuje vedení

prověřit možnost přímých nákupů z hlediska legislativy i na ÚOCHB.

Rada navrhuje revokovat diskusi o možnosti využití FKSP k poskytování stravenek i těm pracovníkům ÚOCHB, kteří se nechtějí stravovat v menzách ČVUT.

Rada vzala na vědomí, že v souvislosti se změnou zákona o důchodovém pojištění a některých dalších zákonů se s účinností od 1.1.2010 upravují některé formulace v Dodatku č.4 Kolektivní smlouvy, v aktualizaci směrnice Vnitřní mzdový předpis, v aktualizaci směrnice Stravování zaměstnanců a v aktualizaci směrnice Sociální fond. Tato usnesení byla přijata jednomyslně.

Radou schválené důležité dokumenty jsou součástí Vnitřních směrnic ÚOCHB AV ČR, v. v. i. Zápisy ze zasedání Rady ÚOCHB jsou přístupné na <http://www.uochb.cas.cz/Zpravy/Rada/>

### **Dozorčí rada:**

V roce 2009 se Dozorčí rada sešla celkem na 3 zasedáních. Účast členů a nejdůležitější projednávané body podává následující rekapitulace:

Zasedání 27. ledna 2009 - společné zasedání Dozorčí rady a Rady ÚOCHB AV ČR, v. v. i., viz výše

#### Zasedání 12. června 2009

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

Omluveni: Chalupa T.

Hosté: Havlas Z. (ředitel ÚOCHB AV ČR, v. v. i. ), Petschová B. (zástupkyně ředitele pro věci ekonomické)

Nejdůležitější projednávané body:

- Rada se seznámila s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření ÚOCHB AV ČR, v. v. i. za rok 2008 a po projednání drobných připomínek ji přijala.
- Rada hodnotí manažerské schopnosti ředitele ve vztahu k pracovišti jako vynikající, poukázala však na nižší informovanost řadových pracovníků ústavu o zásadních rozhodnutích.
- DR uděluje předchozí souhlas k prodeji lokality Petrov.
- DR uděluje předchozí souhlas k nákupu lokality Papírenská.
- DR uděluje předchozí souhlas k nabytí dvou přístrojových sestav jako movitého majetku z grantů EU.
- DR bere se souhlasem na vědomí návrh rozpočtu na rok 2009.

#### Zasedání 18. listopadu 2009

Přítomni (dle presenční listiny v abecedním pořadí, bez titulů): Illnerová H., Rákosník J., Šaman D., Šebo P.

Omluveni: Chalupa T., Šebek P.

Hosté: Havlas Z., Petschová B.

Nejdůležitější projednávané body:

- DR uděluje předchozí souhlas k prodloužení smlouvy o pronájmu mezi ÚOCHB a ÚMG.

- DR uděluje předchozí souhlas k uzavření smlouvy mezi ÚOCHB a IOCB TTO.
- DR uděluje předchozí souhlas k nabytí výkonnějšího EPR spektrometru.
- DR určila firmu Pagina Bohemia, s.r.o., jako auditora hospodaření ÚOCHB pro příští období.
- DR vzala na vědomí informace o komunikaci mezi pracovníky ÚOCHB, konstatovala pozitivní posun v této oblasti a doporučila vedení ústavu věnovat pozornost některým aktuálním podnětům.
- DR vzala na vědomí informace o rekonstrukci a přípravě stavby na ÚOCHB.

Všechny zápisy z e zasedání Dozorčí rady ÚOCHB jsou přístupné na [http://www.uochb.cas.cz/Zpravy/Dozorci\\_rada/](http://www.uochb.cas.cz/Zpravy/Dozorci_rada/)

## II. Informace o změnách zřizovací listiny:

Na základě rozhodnutí zřizovatele podle §15 písmena a) zákona o VVI a vyjádření Dozorčí rady podle §19 odstavec 1 písmeno e) zákona o VVI došlo v roce 2009 ke změně zřizovací listiny ve smyslu rozšíření oblastí jiné činnosti. Od 2. dubna 2009 je předmětem jiné činnosti provozování nestátního zdravotního zařízení v rozsahu vymezeném rozhodnutím o registraci, a to ordinace praktického lékaře a stomatologické ordinace; výroba, obchod a služby v oblasti organické chemie a biochemie, zejména syntetizování chemických látek, izolace, purifikce, a charakterizace chemických a biologických látek, testování biologické aktivity, radioaktivní značení látek, analýzy chemického a biologického materiálu a speciální měření chemických biologických vlastností; dále pak výroba, instalace a opravy elektrických, elektronických a mechanických strojů, přístrojů a zařízení.

### III. Hodnocení hlavní činnosti:

#### 1, Vědecká činnost pracoviště a uplatnění jejích výsledků

##### 1a) stručná charakteristika vědecké činnosti pracoviště

**Česky:** Náplní práce ústavu je základní výzkum v oblastech organické chemie, biochemie a příbuzných disciplínách, převážně orientovaný k aplikacím v lékařství a životnímu prostředí. Podílí se na vzdělávání na universitní úrovni a vedení diplomových a doktorských prací; je sídlem komise pro obhajoby doktorských disertací v oboru organická a bioorganická chemie.

Ústav dlouhodobě spolupracuje s americkou biofarmaceutickou společností Gilead sciences, která se zabývá výzkumem, vývojem a distribucí inovativních léků v oblastech, kde potřeby zdravotnictví zůstávají dosud nenaplněny. Ústav s touto firmou založil 13. 7. 2006 výzkumné centrum.

Výzkum je orientován do sedmi základních oblastí:

**Bioorganická a medicínální chemie** – přináší dlouhodobě vynikající výsledky, které svým významem překračují hranice ústavu i Akademie věd. Výzkum je cílený hlavně na vývoj léků proti leukémii a jiným nádorovým onemocněním a virovým onemocněním, jako jsou AIDS nebo hepatitida.

**Biochemie a molekulární biologie** – zabývá se zejména studiem struktury a aktivity enzymů (proteázy), proteinovými komponentami virů a dalších patogenů (HIV, kvasinky) a strukturou a aktivitou peptidů a jejich analogů.

**Organická syntéza** - zabývá se obecnými principy přípravy látek, syntézou tzv. funkčních molekul s vlastnostmi shodnými pro tvorbu nanomateriálů a materiálu pro molekulovou elektroniku a samoskladbu.

**Chemie přírodní látek** – zabývá se studiem rostlinných materiálů, určuje skupiny látek, pomocí nichž komunikuje hmyz, stanovuje značkovací feromony, sexuální feromony aj., s následným využitím v praxi při hubení škůdců.

**Spektroskopie a fyzikální organická chemie** – studium a využití fyzikálních metod pro určování struktur organických látek, studium vztahů mezi jejich strukturou a fyzikálními vlastnostmi. Pozornost je zaměřena i na určování fyzikálních vlastností biologicky významných molekul.

**Výpočetní chemie** - jde o teoretickou chemii, která se zabývá aplikací kvantové chemie a molekulárních simulací na předpovědi struktury, reaktivity a vlastností organických molekul a biomolekul.

**Společná laboratoř ÚOCHB a VŠCHT** – hlavním úkolem společné laboratoře ÚOCHB a Ústavu biochemie a mikrobiologie Fakulty potravinářské a biochemické technologie VŠCHT v Praze je zkoumat látky schopné ovlivňovat biologickou aktivitu vybraných enzymů (syntetizujících i štěpících organické látky) a dalších proteinů.

**Anglicky:** The institute carries out fundamental research in organic chemistry, biochemistry and related disciplines, focusing in particular on medical and environmental applications. It educates graduate students. It is the seat of the Committee for defense of doctor of science dissertations in organic and bio-organic chemistry.

The Institute has established a long-term cooperation with the American biopharmaceutical company, Gilead Sciences, which deals with research, development, and distribution of novel pharmaceuticals. The institute and the company established a joint research center on July 13, 2006.

The main research areas are listed below:

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

**Biochemistry & Molecular Biology** – deals in particular with the study of the structure and activity of enzymes (proteases), protein components of viruses and other pathogens (HIV, yeasts), and structure and activity of peptides and their analogs.

**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.

**Natural Products Chemistry** – deals with the study of plant materials, searches for substances used for communication of insects, determines pheromones and other semiochemicals with subsequent utilization for pest control. Peptides with antibacterial activity are also studied.

**Spectroscopy & 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.

**IOCB & ICT Joint Laboratory** - the main task of the Joint Laboratory of IOCB and the Department of Biochemistry and Microbiology, Faculty of Food and Biochemical Technology of the ICT Prague is to influence the biological activity of selected synthesizing and degradative enzymes and some other proteins.

### 1b) výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti

Výsledky vědeckých aktivit ústavu v roce 2009 shrnuje 265 publikací v mezinárodních impaktovaných časopisech, 7 publikací v (dosud) neimpaktovaných časopisech, 1 kniha, 6 kapitol v knihách a 11 udělených patentů. K nejvýznamnějším výsledkům patří:

1 Poř. č.	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
1	MAILD (Matrix-Assisted Ionization/Laser Desorption) – nová metoda pro cílenou metabolomiku	1
2	Vysvětlení reakčního mechanismu glutamát karboxypeptidasy II pomocí mutagenese, rentgenové strukturní analýzy a metod výpočetní chemie.	2
3	Studium reakčního mechanismus Mn superoxid dismutázy pomocí kombinovaných QM/MM a multikonfiguračních metod.	3
4	Vývoj obecné metodiky syntéz modifikovaných nukleobází kombinací cross-coupling and C-H aktivačních reakcí	5, 14
5	Vícebarevné elektrochemické značení DNA pomocí kombinace redox značek a využití v minisekvenacích DNA	13, 20, 24
6	Vývoj metodiky syntéz purinových nukleosidů nesoucích funkcionalizované substituenty v poloze 6 a jejich cytostatická aktivita	7, 8
7	Vývoj modulární metodiky syntéz C-nukleosidů a jejich aplikace v chemické biologii	21, 22, 23
8	Objev nového typu nanomolárních cytostatik na bázi 6-aryl-7-deazapurinových ribonukleosidů	17, 18
9	Prozkoumání štěpení modifikovaných DNA restričními enzymy	16,25
10	Syntéza isoprenoidních sloučenin	15
11	Katalytická dimerizace alkynů	19
12	Vývoj nových chirálních katalyzátorů a asymetrické reakce	9,11,12
13	Konjugáty ferrocenu a Dewarových benzenů	10
14	Syntéza a studium biologických vlastností perfluorlakylovaných brassinosteroidů	4, 6
15	Inhibice hypoxanthin-guanin-xanthin fosforibosyltransferasy acyklickými nukleosidfosfonáty: Nová skupina antimalarických terapeutik	26,27
16	Vypracování syntéz nových strukturních typů konformačně uzamčených karbocyklických analogů nukleosidů s různými typy purinových bazí. Látky vykazující vysoké hodnoty aktivit proti Cocksackie virům mají jen minimální cytotoxicitu a jsou v současné době předmětem intenzivního protivirového výzkumu (Rega Institute Katholieke	28,29,30, 31

1 Poř. č.	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
	Universiteit, Leuven, Belgie).	
17	Syntéza 2-amino-4,6-bis[(fosfonomethoxy)alkoxy]pyrimidinů nesoucích dva stejné nebo různé achirální nebo chirální fosfonoalkoxylové řetězce. Látky byly připraveny aromatickou nukleofilní substitucí 2-amino-4,6-dichlorpyrimidinu nebo alkylací 4,6-dihydroxy-2-(methylsulfanyl)pyrimidinu příslušným alkylačním činidlem nesoucím fosfonátovou skupinu. Enantiomerní čistota látek byla stanovována kapilární elektroforézou.	32
18	Syntéza analogů acyklických difosfátů nukleosidů obsahujících (fosfonomethyl)fosfonylovou skupinu a studie jejich fosforylace.	33
19	Byla připravena série nových 5-aryl substituovaných acyklických nukleosidfosfonátů jako inhibitorů lidské thymidinofosforylasy. Jejich rychlá příprava využívá Pd-katalyzovanou Suzuki-Miyaura coupling reakci různých arylboronových kyselin s 5-bromo-4-(fosfonomethoxy)-2,6-dibutoxypyrimidinem.	34
20	Syntéza a vlastnosti dlouhých helikálních aromátů	35
21	Enantioselektivní organokatalýza pomocí neracemických azahelicenů	36
22	Kapitola o helicenech v knize "Strained Hydrocarbons"	37
23	Byla vyvinuta nová efektivní metoda pro aerobní oxidaci snadno dostupných amínových substrátů na karbonylové sloučeniny.	38
24	Byla popsána nová reakce imínů s disulfidy katalyzovaná mědí, využívající role přítomného disulfidu jako oxidačního činidla.	39
25	Totální syntéza 15-F2t-Isoprostanu	40
26	Selektivní syntéza thiofenů a jejich oligomerizace na prkursory elektronických a sensorických materiálů	41
27	Radikály a katalýza přechodovými kovy	42
28	Syntéza pyrrolidinů oxidativní cyklizací beta-amino esterů	43
29	Přehled chemie nitroaminů	44
30	Byla vyvinuta nová metoda nukleofilní trifluormethylace karbonylových sloučenin, disulfidů a diselenidů pomocí diethyl trifluormethylfosfonátu.	45
31	Tvorba vazeb C-C prostřednictvím organokovového katalyzátoru na bázi ruthenia v přítomnosti biologického materiálu a vzduchu.	46
32	Helquaty: snadná, modulární a robustní syntéza nových helikálních dikationtů.	47, 50
33	Tvorba vazeb C-C prostřednictvím organokovového katalyzátoru na bázi ruthenia v přítomnosti vzduchu: řada katalytických procesů zahrnujících (C5Me5)Ru or (C5H5)Ru toleruje přítomnost kyslíku.	48
34	Helquaty, nové helikální extendované diquaty jako rychlé přenašeče elektronů.	49

1 Poř. č.	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
35	Inhibitory lidské betain-homocystein S-methyltransferázy pomáhají objasnit reakční mechanismus enzymu	51
36	Náhrada estrogenu zlepšuje centrální rezistenci k leptinu u ovariektomovaných myší na vysokotučné dietě	52
37	Molekulární rotory na Au(111). Orientace rotátoru z IČ spektroskopie.	53,54
38	Molekulární struktura karboranů	55,56
39	Nové lipofilní kationty 2-amino-N,N'-dialkyl-4,5-dimethyl-imidazolia: syntéza, struktura, vlastnosti a mimořádná tepelná stabilita v zásaditém médiu.	57
40	Obecná jednostupňová syntéza alkynů z enolizovatelných karbonylových sloučenin	58
41	Syntéza rigidního alfa-cyklodextrinového duplexu reversibilně spojeného disulfidovými vazbami a studium jeho inkluzních komplexů.	59
42	Syntéza tubulárního alfa-cyklodextrinového duplexu spojeného třemi disulfidovými vazbami a studium jeho inkluzních komplexů.	60
43	Originální synton, methyl 4-toluensulfonyloxymetylfosfonát jako verzatilní činidlo pro zavádění fosfonomethyl skupiny na -OH, -SH, -NH <sub>2</sub> skupiny organických sloučenin ve vysokém výtěžku a bez nežádoucí metylace, umožňující dále snadnou přípravu různých diesterů fosfonových kyselin.	61
44	Čtyři nová činidla pro kvantitativní syntézu uracilového a thyminového skeletu substituovaného v poloze 1-N z nejrůznějších typů aminoderivátů s rozdílnou bazicitou a stereochemickým uspořádáním.	62
45	Syntéza N-fosfonoalkylderivátů pyrrolidinových nukleosidů syntonovou metodou.	63
46	Syntéza N-fosfonoalkyl a fosfonoacylderivátů prolinolových nukleosidů.	64
47	Syntéza série pyrrolidinových oligonukleotidů na pevné fázi s alternujícími fosfonátovými a fosfodiesterovými internukleotidovými vazbami a studium fyzikálně chemických vlastností.	65
48	Příprava strukturně variabilních lineárních a cyklických analogů oligoadenylátů s 2'-5' a 3'-5' internukleotidovými vazbami spontánní oligomerizací aktivovaných adeninových nukleosidfosfonátů.	66
49	Syntéza TpT dimeru s C3'-O-P-13CH <sub>2</sub> -O-C4'' internukleotidovou vazbou značenou uhlíkem 13C a detailní konformační analýza modifikovaného cukr-fosfátového řetězce.	67
50	Syntéza pregnanových derivátů substituovaných v polohách 3 a 7 a sledování jejich působení na funkci NMDA receptoru	68
51	Syntéza derivátů brassinosteroidů fluorovaných v postraní řetězci a sledování jejich biologické účinnosti	69
52	Syntetické přístupy k steroidním dimerům a oligomerům s koncovou jednotkou cholesterolu	70
53	Syntéza steroidních derivátů pro identifikaci a kvantifikaci steroidních hormonů v rostlinách	71
54	Deriváty allopregnanolonu (3alfa-Hydroxy-5alfa-pregnan-20-on) s polárním řetězcem v poloze 16alfa: syntéza a	72

1 Poř. č.	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
	aktivita.	
55	Charakterizace proteas z virů HIV resistantních vůči proteasovému inhibitoru Darunaviru	73
56	Mechanismus účinku glutamátcarboxypeptidasy II	74
57	Byla provedena studie regulace proteolýzy u patogenní kvasinky <i>Candida parapsilosis</i> . Zjistili jsme, že proteáza Sapp1p, sekretovaná touto kvasinkou, má vyšší katalytickou účinnost než isoenzym Sapp2p. Gen <i>SAPP2</i> je transkribován konstitutivně, zatímco gen <i>SAPP1</i> je indukibilní a je transkribován jen v přítomnosti exogenní bílkoviny jakožto jediného zdroje dusíku.	75
58	Byla vyřešena 3D krystalová struktura proteázy Sapp1p z <i>C. parapsilosis</i> v komplexu s pepstatinem A, klasickým inhibitorem aspartátových proteáz. Struktura Sapp1p byla řešena z proteinu produkovaného přímo <i>C. parapsilosis</i> a jedná se o první publikovanou strukturu Sap z <i>C. parapsilosis</i> .	76
59	Struktura N-terminální domény retrovirového kapsidového proteinu Mason-Pfizerova opičího viru byla vyřešena pomocí NMR. Tato struktura sestává ze šesti $\alpha$ -helixů a N-terminální $\beta$ -smyčky, která je stabilizována interakcí Pro1 a Asp57. NMR data, naměřená u dvou mutantů, u nichž nedochází ke stabilizaci $\beta$ -smyčky ( $\Delta$ P1NTDCA a D57ANTDCA) byla porovnána se spektry získanými pro wt. Zjištěné změny struktury byly potvrzeny biochemickými daty.	77
60	Bylo prokázáno, že u myšího retroviru MMTV dochází v savčích buňkách k předčasnému štěpení Gag polyproteinů, což výrazně snižuje účinnost sbalování nezralých virových částic a jejich produkci.	78
61	Byla mapována specifita integrační reakce HIV-1 integrasy pomocí série oligonukleotidů s různou strukturou odvozenou od potencionálních integračních míst. Ukázalo se, že specifita je ovlivňována především sekundární strukturou ON.	79
62	Klíště <i>Ixodes ricinus</i> je přenašečem klíšťové encefalitidy a lymfské boreliózy. Identifikovali jsme trávicí proteázy nezbytné pro metabolismus klíštěte jako nové perspektivní antigeny pro vývoj vakcíny proti klíšťatům.	80
63	Popsali jsme funkční a strukturní vlastnosti nového typu alkalických amyláz, které jsou trávicí enzymy larev motýlů. Inhibice aktivity těchto enzymů umožňuje potlačit vývoj hmyzích skladištních škůdců jako je zavíječ moučný.	81
64	Kombinované klasické a kvantově-chemické simulace hydratačních vlastností biomolekul	82-85
65	Návrh inhibitorů proteázy viru HIV odvozených od metalakarbonů.	86
66	Monografie o nekovalentních interakcích podává ucelený pohled na svět nekovalentních interakcí a to jak z teoretického, tak i z experimentálního hlediska.	87

1 Poř. č.	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
67	Semiempirická kvantově chemická metoda PM6 byla modifikována pomocí aditivních členů zahrnujících disperzní energii a energii vodíkové vazby. Výsledná metoda (PM6-DH2) popisuje velmi přesně různé typy nekovalentních interakcí a současně dovoluje studovat rozsáhlé biomolekulární systémy. Metoda je vhodná např. pro návrh nových léků.	88
68	Patrový komplex metyladeninu s metylthyminem byl studován pomocí nejpřesnějších kvantově-chemických metod na úrovni CCSD(T) se zahrnutím úplné báze AO. Jedná se patrně o vůbec největší výpočet provedený na této úrovni, jehož cílem bylo ukázat velikost CCSD(T) korekčního členu.	89
69	Ionizační energie komponent nukleových kyselin ve fyziologickém prostředí	90
70	Specifická adsorpce iontů na povrchu buněčné membrány	91,92
71	První sloučeniny křemíku s neonem a argonem	93
72	V jedu divoké eusociální včely <i>Lasioglossum laticeps</i> jsme objevili tři nové peptidy mající vysokou antimikrobiální aktivitu a nízkou toxicitu vůči eukaryotním buňkám. Tyto tři antimikrobiální peptidy nazvané lasioglossiny (LL-I, LL-II a LL-III) byly zařazeny do Antimicrobial Peptide Databáze pod evidenčními čísly APO1465-1467. Měřením jejich struktury metodou cirkulárního dichroismu a NMR jsme zjistili, že tyto tři strukturně si velmi podobné peptidy zaujímají v anisotropním prostředí ohnutou amphipathickou $\alpha$ -helikální konformaci mající konkávní hydrofobní stranu a konvexní hydrofilní stranu. Lasioglossiny jsou vhodnou strukturou pro vývoj nových účinných peptidových antibiotik, a proto byla připravena a testována série analogů. Vynález je předmětem patentové přihlášky PCT/CZ 2009/000034.	94
73	Jako prvním se nám podařilo identifikovat, mnohými pracovišti již dlouho hledaný, antimikrobiální peptid imunitního systému larev mouchy <i>Lucilia sericata</i> , které se v medicíně využívají v tzv. larvální terapii pro léčbu nekrotických ran, jako jsou například nehojící se rány dolních končetin diabetiků, či při léčení bérceových vředů. Jedná se o peptid složený z 40 aminokyselin, jehož řetězec je propojen třemi disulfidovými vazbami. Tento peptid jsme nazvali lucifensin. Lucifensin jsme isolovali z extraktu různých larválních tkání, ale též ze sekretů a exkrementů larev metodami ultrafiltrace a vysoce účinné kapalinové chromatografie za pomoci detekce jednoduchým testem antimikrobiální aktivity. Jeho strukturu jsme stanovili technikami Edmanova odbourávání a hmotnostní spektrometrie.	95
74	Neodolatelná vůně smrti - aneb jak hrobařci rodu <i>Nicrophorus</i> vyhledávají potravu	96,97
75	Byla vyvinuta nová, rychlá a vysoce citlivá kapilární elektroforetická metoda pro chirální analýzu významného léku proti AIDS, 9-(R)-[2-(fosfonomethoxy)propyl]adeninu ((R)-PMPA, tenofoviru), a příbuzných antivirových	98,32

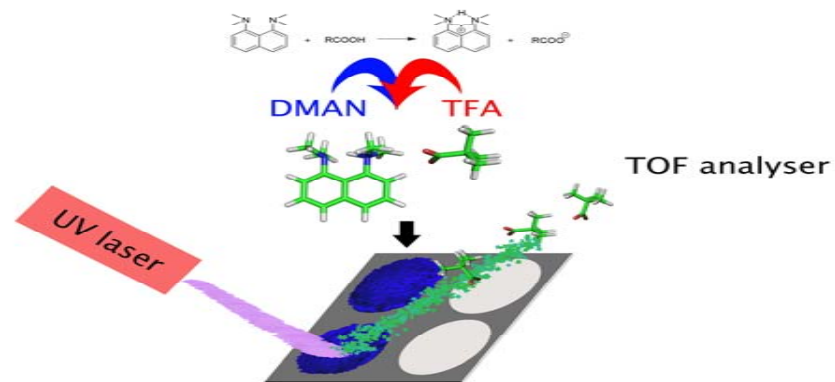
1 Poř. č.	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
	acyklických nukleosid fosfonátů (ANPs). Metoda je založena na přidavku chirálního selektoru, β-cyklodextrinu, do základního elektrolytu kapilární elektroforézy a umožňuje úplné rozdělení (R,S)-enantiomerů PMPA a příbuzných ANPs v krátkém čase 5 – 15 minut. S využitím UV-absorpční detekce se koncentrační detekční limity analyzovaných ANPs pohybovaly v mikromolárním až submikromolárním rozsahu, pro jednu analýzu tak postačí několik femtomolů látky v objemu 2 – 5 nanolitrů. Metoda se používá ke kontrole chirální čistoty nově připravovaných preparátů ANPs dodávaných k biologickým testům firmě Gilead Science Inc. Kontrola chirální čistoty léčiv je nesmírně důležitá, neboť léčebnou aktivitu má často pouze jeden ze dvou optických izomerů dané látky, zatímco druhý izomer může být toxický.	
76	Kapilární afinitní elektroforéza (CAE) a kvantově chemická teorie funkcionálu hustoty (DFT) byly využity ke studiu nekovalentních interakcí valinomycinu, makrocyclického antibiotického dodekadepsi-peptidového ionoforu, s kationty lithia, sodíku a rubidia v nevodném prostředí. Zdánlivá vazebná konstanta komplexů valinomycinu s těmito kationty alkalických kovů v methanolu byla stanovena metodou CAE a strukturní charakteristiky těchto komplexů byly vypočteny a popsány metodou DFT.	99-102
77	Byla studována izotopová výměna vodíku v poloze 5 derivátů pyrimidinu. Na základě NMR experimentů a teoretických výpočtů byl určen mechanismus výměny v kyselém i alkalickém prostředí..	103
78	Byl studován metabolismus karcinogenního barviva Sudanu I, byla zjištěna struktura jeho metabolitů a kovalentních aduktů na nukleové kyseliny.	104
79	Příprava vektorů a genetická modifikace technologických plodin se zvýšenou expresí bakteriálních degradačních genů zodpovědných za štěpení PCB a genů způsobujících zvýšenou akumulaci těžkých kovů.	105, 107, 109, 110, 115
80	Zjištění vlivu sekundárních metabolitů rostlin na změny zastoupení mikroorganismů v rhizosféře rostlin a zvýšení účinnosti biodegradace organických sloučenin v půdě.	106, 108, 109, 111-115
81	Patentová ochrana výsledků dosažených v oblasti výzkumu nepyrogných 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 protinfekční a protinádorové imunity, (c) úprava haemopoiesy poškozené radio- popř. chemoterapií.	116,117

## 1c) anotace vybraných výsledků

Pořadové číslo anotace: 1

### **MAILD (Matrix-Assisted Ionization/Laser Desorption) – nová metoda pro cílenou metabolomiku**

Byla vyvinuta nová technika, nazvaná MAILD („Matrix-Assisted Ionization/Laser Desorption“), která je založena na dnes již klasické metodě hmotnostní spektrometrie (MALDI-TOF/MS). Umožňuje rozpoznávat velké množství metabolitů v biologickém materiálu, což otevírá dveře pro tzv. cílenou vysokokapacitní metabolomiku. Nová metoda MAILD spočívá v nalezení tzv. „chytrých maticí“, které samy o sobě neprodukují žádné nežádoucí ionty rušící hmotnostní spektrum. Právě tyto rušící ionty znemožňovaly analýzu malých molekul, které hrají zásadní roli v metabolismu rozličných organismů. Nežádoucí ionty pocházející ze standardních maticí se tak dají připodobnit ke kupce sena, ve které se snažíme najít pár malých, ale velmi důležitých jehliček. A tak, místo aby se stále zlepšovalo pátrání po jehlách, tj. metabolitech (cukry, mastné kyseliny, aminokyseliny a další organické sloučeniny), začali vědci vymýšlet matrice, které by si jednak zachovaly svoji funkci, ale zároveň by nedávaly vzniknout iontům rušícím měření metabolitů. Jinými slovy, badatelé se snažili odstranit onu kupku sena a učinit jehly viditelnými.



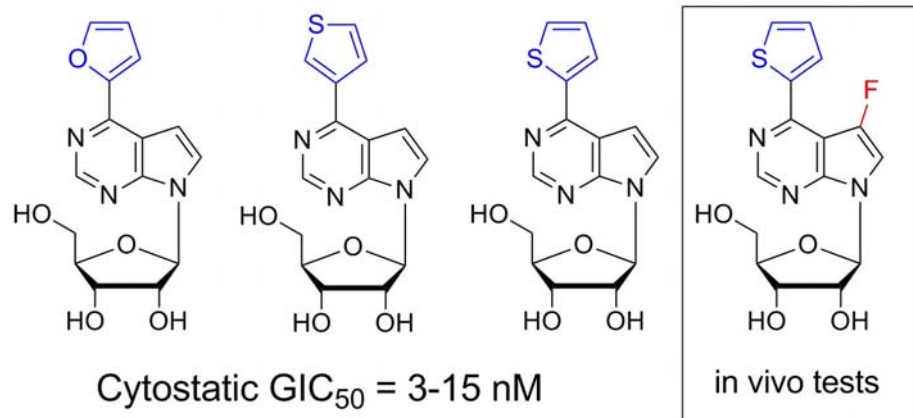
Citace výstupu: Shroff, R. - Rulíšek, L. - Doubský, J. – Svatoš A.: Acid– base-driven matrix-assisted mass spectrometry for targeted metabolomics. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A , Roč. 106, č. 25 (2009), s. 10092- 10096

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Lubomír Rulíšek, [rulisek@uochb.cas.cz](mailto:rulisek@uochb.cas.cz) +420-220-183-263; Aleš Svatoš, [svatos@ice.mpg.de](mailto:svatos@ice.mpg.de); +49-3641-571700

Pořadové číslo anotace: 2

### 6-Hetaryl-7-deazapurin ribonukleosidy - nový typ nanomolárních cytostatik

V rámci systematického studia biologické aktivity purinových a deazapurinových nukleosidů byl objeven mimořádně silný cytostatický účinek 6-hetaryl-7-deazapurinových ribonukleosidů. Velká série látek tohoto strukturního typu byla připravena pomocí cross-coupling reakcí 6-chlor-7-deazapurinových nukleosidů s hetarylboronovými kyselinami nebo hetarylstannany. Studium jejich biologické aktivity ukázalo, že zejména látky substituované v poloze 6 furylovou nebo thienylovou skupinou a obsahující v poloze 7 vodík nebo fluor, vykazují cytostatický efekt proti širokému spektru buněčných linií tumorů a leukemií při nanomolárních koncentracích (srovnatelná s klinicky používanými cytostatiky Gemcitabinem a Clofarabinem). Byl také studován jejich metabolismus a prokázána jejich enzymatická fosforylace na nukleosid trifosfáty a následná inhibice RNA polymeras. Byla vybrána nejnadějnější látka, 6-(2-thienyl)-7-fluor-7-deazapurin ribonukleosid, která postoupila do preklinických in vivo testů ve FN Olomouc, kde předběžné výsledky toxikologie a in vivo aktivity na myších modelech vypadají velmi nadějně pro další pokračování vývoje těchto nových cytostatik.



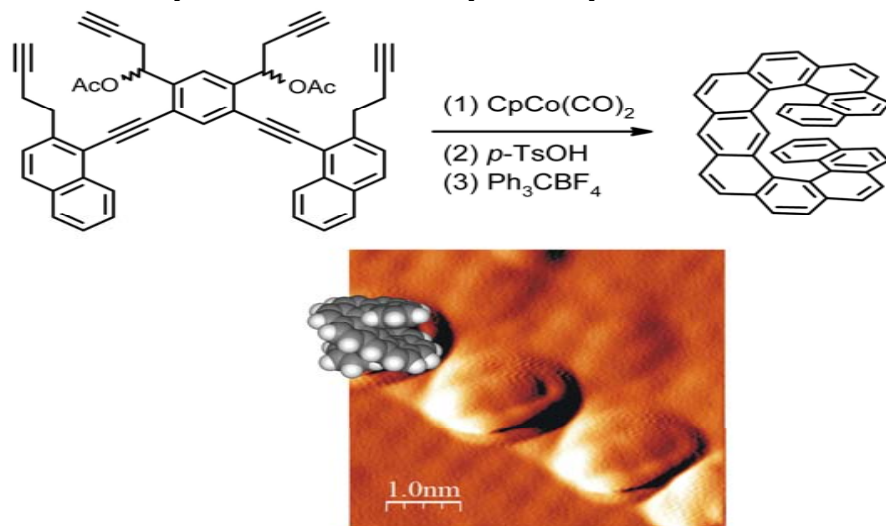
**Citace výstupu:** Nauš, P. - Hocek, M.: Novel cytostatic 7-deazapurine nucleosides. Patentová přihláška: WO2009089804. Nauš, P. - Pohl, R. - Votruba, I. - Džubák, P. - Hajdúch, M. - Ameral, R. - Birkuš, G. - Wang, T. - Ray, A. S. - Mackman, R. - Cihlar, T. - Hocek, M.: 6-(Het)aryl-7-Deazapurine Ribonucleosides as Novel Potent Cytostatic Agents. *Journal of Medicinal Chemistry*, Roč. 53, č.1 (2010) s. 460-470.

**Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail):** Doc. Ing. Michal Hocek, DSc., 220183324, [hocek@uochb.cas.cz](mailto:hocek@uochb.cas.cz)

Pořadové číslo anotace: 3

### Syntéza a vlastnosti dlouhých helikálních aromátů

Materiály či sloučeniny bohaté na uhlík a obsahující delokalizované  $\pi$ -elektrony, jejichž typickými představiteli jsou fullerény, uhlíkaté nanotrubky či grafen, přitahují mimořádnou pozornost. Předpokládá se řada jejich aplikací v nanotechnologii, molekulární elektronice, materiálovém inženýrství a dalších oborech. Do této skupiny uhlíkatých sloučenin patří též dlouhé heliceny, což jsou aromáty skládající se z většího počtu kondenzovaných benzenových jader a zaujímaví šroubovicové uspořádání. Podařilo se nám připravit [11]antrahelicen a jeho analoga, jejichž příprava je založena na reakcích v přítomnosti přechodných kovů. Klíčovým stupněm syntézy je násobná cyklizace rozvětveného acetylénového prekursoru za katalýzy komplexu niklu či kobaltu, při které vzniká kontrolovaným způsobem požadovaná uhlíkatá šroubovice. Vybrané dlouhé heliceny se nám podařilo získat v neracemické formě jako separované pravotočivé a levotočivé šroubovice, určili jsme bariéru přechodu mezi nimi a na základě kvantově chemických výpočtů jsme navrhli i mechanismus tohoto procesu. Ve spolupráci s Jagelonskou univerzitou v Krakově jsme studovali organizaci racemického i opticky čistého [11]antrahelicenu na povrchu polovodiče InSb pomocí rastrovací tunelové mikroskopie (STM), přičemž bylo dosaženo submolekulového rozlišení a byla určena orientace jednotlivých molekul na tomto pevném povrchu.



Citace výstupu: Sehnal, P. - Stará, I. G. - Šaman, D. - Tichý, M. - Míšek, J. - Cvačka, J. - Rulíšek, L. - Chocholoušová, J. - Vacek, J. - Goryl, G. - Szymonski, M. - Císařová, I. - Starý, I.: An organometallic route to long helicenes. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A , Roč. 106, č. 32 (2009), s. 13169-13174.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): RNDr. Ivo Starý, CSc., +420-220 183 315, stary@uochb.cas.cz

1d) domáci a zahraniční ocenění zaměstnanců pracoviště

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
1	Antonín Holý	Čestný doktorát Jihočeské univerzity	Celoživotní dílo	Rektor JU
2	Antonín Holý	Čestné členství v České hepatologické společnosti	Vědecké výsledky v medicíně chemii	Čs. Hepatologická společnost
3	Petr Jansa	Invited speaker (2 <sup>nd</sup> Annual World Summit of Antivirals 2009, Peking, Čína 18.-20.7. 2009)	Vědecké výsledky v oboru medicíně chemie	BIT Life Sciences
4	Helena Mertlíková Kaiserová	Medaile Farmaceutické fakulty UK	Medaile Farmaceutické fakulty UK	FaF UK
5	Jiří Šrogl	Graduate Faculty	Vědecko - pedagogická činnost.	Department of Molecular and Biomolecular engineering, North Carolina State university, Raleigh, USA
6	Pavel Jungwirth	Zvolen členem US ČR		Učená společnost ČR
7	Václav Kašička	Stal se jedním z osmi editorů časopisu Journal of Separation Sciences		Elsevier
8	Filip Teplý	Cena Alfreda Badera za organickou chemii za rok 2009	Soubor prací - Helquat a tvorba vazeb C-C prostřednictvím organokovů v přítomnosti biologického materiálu	Česká společnost chemická
9	Lukáš Severa	Mezi pěti nejlepšími příspěvky na IX. Mezioborovém setkání	Příspěvek s názvem: [7]HELQUAT: Flexibilní syntéza symetrických a nesymetrických	Sigma-Aldrich, Komise odborníků na IX.

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
		mladých biologů, biochemiků a chemiků pořádaném firmou Sigma-Aldrich, 26.-29.5. 2009	helikálních dikationtů	Mezioborovém setkání mladých biologů, biochemiků a chemiků
10	Lukáš Severa	3. místo na studentské vědecké konferenci VŠCHT, 20.11. 2009, VŠCHT, Praha	Příspěvek s názvem: Syntéza nesymetrických [7]helquatů	VŠCHT, Komise odborníků

1e) další specifické informace o pracovišti

- Ústav spolupracoval s organizátory české části výstavy EXPO 2010 v Šanghaji a připravil část expozice věnované objevům prof. A. Holého a ústavu.

- Elektronická verze časopisu Collection of Czechoslovak Chemical Communications (<http://cccc.uochb.cas.cz>), jehož vydavatelem je ÚOCHB, byla vybrána Národní knihovnou ČR jakožto kvalitní zdroj, který by měl být uchován do budoucna a stát se součástí českého kulturního dědictví. Webové stránky byly zařazeny do projektu Národní knihovny ČR „WebArchiv“.

- Byl pořízen Büchi reaktor pro přípravu látek ke klinickým zkouškám, jeho menší varianta pro přípravu reakcí a flow reaktor.

- V roce 2009 byly v Laboratoři radioisotopů připraveny následující sloučeniny značené radionuklidy pro potřeby výzkumných týmů z ÚOCHB:

I. Peptidy značené radionuklidem <sup>125</sup>I :

[ <sup>125</sup> I]PrRP-31 rat	3 šarže, celková aktivita 2,8 mCi	pro tým Dr. Maletínské, ÚOCHB
[ <sup>125</sup> I]Tyr-Ala-GHRP-6	3 šarže, celková aktivita 0,3 mCi	pro tým Dr. Maletínské, ÚOCHB
[ <sup>125</sup> I]Ghrelin	4 šarže, celková aktivita 4,8 mCi	pro tým Dr. Maletínské, ÚOCHB
[ <sup>125</sup> I]CART(61-102)	4 šarže, celková aktivita 5,5 mCi	pro tým Dr. Maletínské, ÚOCHB
[ <sup>125</sup> I]DAPA-3-Ghrelin	2 šarže, celková aktivita 5,5 mCi	pro tým Dr. Maletínské, ÚOCHB

[125I]Desoctanoyl-Ghrelin 1 šarže, celková aktivita 0,006 mCi pro tým Dr. Maletínské, ÚOCHB

II. Analogy nukleotidů značené radionuklidem 3H :

9-(2-phosphomethoxyethyl)-2,6-diamino[8-3H]purine

10 mCi

pro tým Dr. Votruby ÚOCHB

9-(2-phosphomethoxyethyl)-[8-3H]guanine

10 mCi

pro tým Dr. Votruby ÚOCHB

(R)- 9-(2-phosphomethoxypropyl)-[8-3H]adenine (tenofovir)

36 mCi

pro tým Dr. Votruby ÚOCHB

## 2. Vzdělávací činnost

2a) účast pracoviště na terciárním vzdělávání (uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů)

1 Číslo	2 Bakalářský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Organická chemie I	PřF UK v Praze	Ano	Ano	Ano		
2	Chemie v přírodních vědách	PřF UK v Praze			Ano		
3	Syntéza a výroba léčiv	VŠCHT Praha			Ano		
4	Organická chemie I	VŠCHT Praha	Ano	Ano	Ano		
5	Organická chemie II	VŠCHT Praha		Ano			
6	Biochemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		Laboratorní kurzy
7	Chemie přírodních látek I.	PřF UK v Praze	Ano				
8	Biologie	PřF UK v Praze			Ano		
9	Potravinářská a biochemická technologie	VŠCHT Praha			Ano		

1 Číslo	2 Magisterský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Biochemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
2	Všeobecné lékařství	1. LF UK Praha	Ano		Ano		
3	Organická chemie	PřF UK v Praze	Ano	Ano	Ano		
4	Organická chemie	VŠCHT Praha			Ano		
5	Bioorganická chemie	Universita Palackého, Olomouc	Ano				
6	Biofyzikální chemie	PřF UK v Praze			Ano		
7	Chemie	VŠCHT Praha	Ano		Ano		
8	Biochemie	VŠCHT Praha			Ano		
9	Mechanismy organických reakcí	VŠCHT Praha	Ano	Ano			
10	Stereoselektivní organické syntézy	VŠCHT Praha	Ano	Ano		Ano	
11	Chemie přírodních látek I.	PřF UK v Praze	Ano				
12	Fyzika	PřF UK v Praze	Ano	Ano	Ano	Ano	
13	Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur	Př F UK v Praze	Ano	Ano	Ano	Ano	Organizace obhajob
14	Fyzika	MFF UK v Praze	Ano	Ano	Ano		
15	Fyzikální chemie	Př F UK v Praze	Ano				
16	Fyzikální chemie	VŠCHT Praha	Ano				
17	Syntéza a výroba léčiv	VŠCHT Praha			Ano		
18	Zoologie - Praktikum etologie	PřF UK v Praze		Ano			
19	Zoologie - Biologie sociálního hmyzu	PřF UK v Praze	Ano				
20	Zoologie - Obecná entomologie	PřF UK v Praze	Ano	Ano			
21	Zoologie	PřF UK v Praze			Ano		
22	Organická chemie - Přírodní látky II	PřF UK v Praze	Ano				
23	Klinická a toxikologická analýza	PřF UK v Praze			Ano		
24	Ochrana lesa III - Chemekologie	ČZU	Ano				
25	Biofyzika	MFF UK v Praze	Ano				
26	Analytická chemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
27	NMR spektroskopie I	PRFUK v Praze	Ano	Ano		Ano	

1 Číslo	2 Magisterský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
28	NMR spektroskopie II	PRFUK v Praze	Ano			Ano	
29	Biochemie a biotechnologie	FPBT VŠCHT Praha	Ano		Ano		
30	Fysiologie rostlin	PřF UK v Praze	Ano				

1 Číslo	2 Doktorský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Organická chemie	Př F UK v Praze			Ano		
2	Organická chemie	VŠCHT Praha			Ano		
3	Bioorganická chemie	Universita Palackého, Olomouc	Ano				
4	Chemie - organická chemie	Masarykova univerzita Brno			Ano		
5	Organic Chemistry	TU Braunschweig (Nemecko)			Ano		
6	Biochemie	Př F UK v Praze	Ano		Ano		
7	Biochemie	VŠCHT Praha			Ano		
8	Chemie přírodních látek I.	Př F UK v Praze	Ano				
9	Mikrobiologie	VŠCHT Praha			Ano		
10	Fyzika	PřF UK v Praze	Ano		Ano	Ano	
11	Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur	Př F UK v Praze	Ano	Ano	Ano	Ano	Organizace obhajob
12	Analytická chemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
13	Analytická chemie	VŠCHT Praha			Ano		

**2b) účast pracoviště na sekundárním vzdělávání (středoškolská výuka)**

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel/škola	4 Činnost
1	Pedagogická činnost (Jiří Blažek)	Technické lyceum Kladno	výuka chemie (přednášky + praktika)
2	SOČ	Gymnasium J. Palacha , Praha 1	vedení prací
3	SOČ	Gymnasium Ústavní, Praha 8	vedení prací

**2c) vzdělávání veřejnosti**

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel	4 Činnost
1	37. Májové hepatologické dny 2009	Hepatologická společnost ČR	Přednáška – Ing. Petr Jansa: „Acyklické nukleosidfosfonáty po 20 letech: současný stav a perspektivy“.
2	Monthly news distribution in Organic Chemistry in „Nachrichten aus der Chemie“	German Chemical Society	Selection of most important News from current organic chemistry literature, preparation of generally understandable text and its publication.
3	Čtvrtletní novinky v oblasti organické chemie v „Chemických Listech“	Česká společnost chemická	Výběr nejdůležitějších novinek z literatury, příprava obecně srozumitelného textu a jeho publikace
4	Broumov 28.-29.5.		Přednáška na ZŠ a Gymnáziu

**3. Činnost pro praxi****3a–1) výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů**

Pořadové číslo: 1

Dosažený výsledek: Nalezení průmyslově použitelného syntetického postupu pro přípravu antivirotika (R)-PMPDAP

Uplatnění/Citace výstupu:

Název projektu /programu v češtině: Výroba (R)-PMPDAP

Název projektu/programu v angličtině: Manufacturing of (R)-PMPDAP

Poskytovatel: UOCHB (Skupina NK, prof. Holý)

Partnerská organizace: Okapi Sciences

Pořadové číslo: 2

Dosažený výsledek: Příprava 150 g (R)-PMPDAP

Uplatnění/Citace výstupu:

Název projektu /programu v češtině: Příprava 150 g (R)-PMPDAP

Název projektu/programu v angličtině: Preparation of (R)-PMPDAP

Poskytovatel: UOCHB

Partnerská organizace: Okapi Sciences

Pořadové číslo: 3

Dosažený výsledek: Klinické testování preparátu GS-9219 na lidech

Uplatnění/Citace výstupu: Výroční zpráva Gilead Sciences za rok 2009

Název projektu /programu v češtině: Klinické testování preparátu GS-9219 na lidech

Název projektu/programu v angličtině: Clinical trials of GS-9219 on human.

Poskytovatel: UOCHB

Partnerská organizace: Gilead Sciences

Pořadové číslo: 4

Dosažený výsledek: příprava vektorů a genetická modifikace technologických plodin se zvýšenou akumulací těžkých kovů

Uplatnění/Citace výstupu: biologické čištění kontaminovaných půd, transgenní rostliny lnu s genem CP / cit. 7, 15

Název projektu /programu v češtině: Centrum funkční genomiky a proteomiky ve šlechtění rostlin.

Název projektu/programu v angličtině: Center for functional genomics and proteomics of plants.

Poskytovatel: MŠMT

Partnerská organizace: AGRITEC Šumperk, s.r.o.

Pořadové číslo: 5

Dosažený výsledek: příprava vektorů a genetická modifikace technologických plodin se zvýšenou expresí bakteriálních degradačních genů zodpovědných za štěpení PCB

Uplatnění/Citace výstupu: biologické čištění kontaminovaných půd, transgenní rostliny lnu s genem *bphC* / cit. 1, 3, 5, 15

Název projektu /programu v češtině: Centrum funkční genomiky a proteomiky ve šlechtění rostlin.

Název projektu/programu v angličtině: Center for functional genomics and proteomics of plants.

Poskytovatel: MŠMT

Partnerská organizace: AGRITEC Šumperk, s.r.o.

Pořadové číslo: 6

Dosažený výsledek: znalost podmínek degradace polychlorovaných bifenylů rostlinami a rhizosférními mikroorganismy.

Uplatnění/Citace výstupu: biologické čištění kontaminovaných půd, / cit. 2, 4, 5, 11, 15

Název projektu /programu v češtině: NPV II Bioremediace půd a sedimentů kontaminovaných polyhalogenovanými aromatickými látkami.

Název projektu/programu v angličtině: National Research Project II, Bioremediation of soils and sediments contaminated by polyhalogenated aromatic compounds.

Poskytovatel: MŠMT

Partnerská organizace: ENVISAN GEM, a.s., VIDIA s.r.o.

Pořadové číslo: 7

Název projektu /programu v češtině: Použití ultrazvuku v nanomedicíně

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 Dobrouč 401

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

Uplatnění/Citace výstupu: 116

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

### 3a–2) výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané na základě hospodářských smluv

1 Číslo	2 Zadavatel	3 Výsledek (anotace)	4 Uplatnění
1	Gilead Sciences, Inc.	Prodej 5 protivirových preparátů: Vistide, Viread, Hepsera, Truvada, Atripla. Zisk z prodeje - Výroční zpráva Gilead Sciences 2009	Léčba pacientů s HIV a hepatitidou B

**Celkový počet získaných výsledků**

1

### 3a–3) 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	IOCB-TTO	Komercializace výsledků vědecké práce ústavu	s.r.o.	Vyhledávání vhodných projektů, pomoc při ochraně duševního vlastnictví, řízení postupu mezi národní a mezinárodní patentovou přihláškou, hledání partnerů, hledání investorů, licenční jednání, smlouvy s partnery atd.
2	Mendel Therapeutic	Přenést výsledky dosažených v oblasti výzkumu nepyrogenních	s.r.o., mezinárodní spin-off firma	Práce na přípravě preklinické a pilotní klinické studie.

1 Číslo	2 Název firmy	3 Důvod založení	4 Kategorie firmy	5 Činnost firmy
		glykopeptidových imuno-therapeutik do klinické praxe.		

### 3b) významné patenty, užité vzory, vynálezy, licenční smlouvy, ochranné známky

Pořadové číslo: 1

Název česky: 5-Fluor-3alfa,17beta-dihydroxy-5alfa-androstan-6-on, způsob jeho výroby a jeho použití pro ovlivňování růstu rostlin.

Název anglicky: 5-Fluor-3alpha,17beta-dihydroxy-5alpha-androstan-6-one, process of its use for influencing plant growth.

Kategorie: patent

Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 20.03.2008. Datum udělení patentu: 04.11.2009. 301228

Popis česky: Příprava 5-fluor-3alfa,17beta-dihydroxy-5alfa-androstan-6-onu a jeho využití pro pozitivní ovlivnění růstu rostlin

Popis anglicky: Preparation of 5-fluor-3alpha,17beta-dihydroxy-5alpha-androstan-6-one and its using for positive influence of plant growing.

Využití: : Regulátor růstu rostlin, v zemědělství, lesnictví atd.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Barbora Slaviková, 220183200, slavikova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 2

Název česky: Pregnanové anionické sloučeniny, způsob jejich výroby a jejich použití.

Název anglicky: [Pregnane anionic compounds, process for preparing thereof and their use

Kategorie: patent

Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 10.07.2008. Datum udělení patentu: 02.11.2009. 301216

Popis česky: Příprava anionických pregnanových derivátů

Popis anglicky: Preparation of anionic pregnance compounds

Využití: neuroprotektivum

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Eva Šťastná, 220183316, šťastna@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 3

Název česky: Pyrimidiny nesoucí alkyfosfonátovou skupinu a metody terapie virových infekcí

Název anglicky: Phosphonate substituted pyrimidine compounds and methods for therapy.  
Kategorie: patent  
Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 16.6.2004. Datum udělení patentu: 28.09.2009. 543864  
Popis česky: Příprava nových látek s antivirální aktivitou  
Popis anglicky: Preparation of new antivirals  
Využití: antivirotikum  
Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Antonín Holý, 220183555, holy@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 4  
Název česky: 6-2'-(Fosfonomethoxy)alkoxy deriváty pyrimidinu mající antivirové účinky  
Název anglicky: 6-2'-(phosphonomethoxy)alkoxy pyrimidine derivatives having antiviral activity.  
Kategorie: patent  
Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 28.06.2002. Datum udělení patentu: 29.09.2009. 2452036  
Popis česky: Příprava nových látek s antivirální aktivitou  
Popis anglicky: Preparation of new antivirals  
Využití: antivirotikum  
Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Antonín Holý, 220183555, holy@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 5  
Název česky: 6-2'-(Fosfonomethoxy)alkoxy deriváty pyrimidinu mající antivirové účinky  
Název anglicky: 6-2'-(phosphonomethoxy)alkoxy pyrimidine derivatives having antiviral activity.  
Kategorie: patent  
Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 28.06.2002. Datum udělení patentu: 25.03.2009. 891366  
Popis česky: Příprava nových látek s antivirální aktivitou  
Popis anglicky: Preparation of new antivirals  
Využití: antivirotikum  
Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Antonín Holý, 220183555, holy@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 6  
Název česky: Imunostimulační účinky trilobolidu a způsob jeho přípravy.  
Název anglicky: [Immunostimulating effects of trilobolide and process for preparing thereof  
Kategorie: patent  
Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 18.07.2007. Datum udělení patentu: 02.07.2009. 30086  
Popis česky: Příprava nových látek s imunostimulačním efektem

Popis anglicky: Preparation of new immunostimulating compounds

Využití: imunostimulátor

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Juraj Harmatha, 220183522, harmatha@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 7

Název česky: Ligandy estrogenových receptorů alfa a beta, způsob jejich přípravy a farmaceutické prostředky, které je obsahují.

Název anglicky: Estrogen receptor alpha and beta ligands, methods for their preparation, and pharmaceutical compositions containing them

Kategorie: patent

Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 05.05.2008. Datum udělení patentu: 26.03.2009. 300376

Popis česky: Příprava nových ligandů estrogenových receptorů

Popis anglicky: Preparation of new estrogen ligands

Využití: ve farmacii

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Martin Katora, 220183147, katora@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 8

Název česky: Izoméře čistý tetradeka-8,10-dienál, spôsob jeho výroby, jeho použitie a jeho dávkovač.

Název anglicky: Tetradeca-8,10-dienals and their use as sexual attractants for leafminer moths

Kategorie: patent

Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 15.06.200. Datum udělení patentu: 07.10.2009. 287049

Popis česky: Syntéza tetradeka-8,10-dienalu a jeho použití jako atraktantu na klíněnku jírovcovou

Popis anglicky: Preparation of tetradeca-8,10-dienals and their use as sexual attractants for leafminer moths

Využití: monitorování doby letu a hustoty populace klíněnky jírovcové

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Blanka Kalinová, 220183339, blanka@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 9

Název česky: Využití  $2\alpha$ ,  $3\alpha$ ,  $17\beta$  - trihydroxy- $5\alpha$ -androstan-6-onu k regulaci vývoje rostlin.

Název anglicky: The use of  $2\alpha$ ,  $3\alpha$ ,  $17\beta$  - trihydroxy- $5\alpha$ -androstan-6-one for plant development regulation.

Kategorie: patent

Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 08.08.2001. Datum udělení patentu: 30.06.2009. PL 202414

Popis česky: Regulace vývoje rostlin snižováním stresu pomocí  $2\alpha$ ,  $3\alpha$ ,  $17\beta$  - trihydroxy- $5\alpha$ -androstan-6-onu.

Popis anglicky: Regulation of plant development by  $2\alpha$ ,  $3\alpha$ ,  $17\beta$  - trihydroxy- $5\alpha$ -androstan-6-one as a stress-decreasing agent.

Využití: v zemědělství

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ladislav Kohout, 220183200, kohout@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 10

Název česky: Cílené deriváty paclitaxelu, jejich způsob výroby a jejich použití.

Název anglicky: Targeted paclitaxel derivatives, process of their preparation and their use.

Kategorie: patent

Zapsán pod číslem: Datum podání přihlášky: 27.06.2007. Datum udělení patentu: 27.08.2009. CZ301004B6

Popis česky: Deriváty s cytostatickým účinkem, který spočívá v působení na dělicí vřeténko buňky.

Popis anglicky: Preparation and use of new cytostatic compounds derived from paclitaxel.

Využití: v humánní medicíně

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Tomáš Vaněk, 233022479, vanek@ueb.cas.cz

Pořadové číslo: 11

Název česky: Nové antimikrobiální peptidy

Název anglicky: Novel antimicrobial peptides

Kategorie: Patentová přihláška

Zapsán pod číslem: PCT/CZ 2009/000034

Popis česky: Jsou popsány čtyři nové antimikrobiální peptidy izolované z přírodního materiálu, jejich syntetická analoga a jejich použití jako antimikrobiálních, protiplísňových, antiparazitických a protirakovinných sloučenin.

Popis anglicky: The invention involves four novel antimicrobial peptides isolated from natural sources, their synthetic analogues and their applications as antimicrobial, antiviral, antifungal, antiparasitic and anticancer compounds. Therefore, they are practical for the production of medication for the treatment of microbial, parasitic and fungal diseases and for the cancer treatment.

Využití: ve farmacii

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Václav Čeřovský, 220183378, cerovsky@uochb.cas.cz

### 3c) výsledky spolupráce se státní a veřejnou správou

Pořadové číslo: 1

Dosažený výsledek: Navázání spolupráce s Centrem biologické ochrany Těchonín

Oblast uplatnění výsledku: Ochrana obyvatelstva před bioterorismem

Uživatel/Zadavatel: Armáda ČR

**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 projektů pro české i zahraniční grantové agentury	GAČR, GAAV, MPO, MZ, MZV, MPO, AERES, DFG	140
2	Posudky grantů a řešení Centrum, NPVII, NAZV	MŠMT, MZe	20
3	Posudky na diplomové a disertační práce	Vysoké školy	160

<b>Celkový počet zpracovaných expertiz</b>	320
--	-----

**4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracovišť**

**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 Koordinační/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 ÚOCHB: Sychrovský	Kato- Japan Matsuda- Japan / 3	USA, Japonsko	Výzkum, vzdělávání

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Koordinační/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
2	NHMRC	Collaborative Research Program	Vývoj purinových nukleosidfosfonátů jako antimalarických léčiv cílených na nukleosidovou syntézu v plasmodiu/Development of Purine nucleoside phosphonates as antimalaric drugs targeting nucleoside synthesis in plasmodium	koordinátor: Luke Guddat, Univ. of Queensland, řešitel ÚOCHB: Holý	Austrálie/2 ČR/1 Belgie/1	Austrálie, Belgie	Vývoj antimalarických léčiv
3	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	
4	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Studium biologicky aktivních látek využitelných pro kontrolu zavíječe Euzophera 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	Xiun Wen + Zhang Zhen	Čína	

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
5	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	
6	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Strukturní studie transkripčních regulátorů rodiny DeoR a GntR účastnících se katabolické represe v bakterii Bacillus subtilis/ Structural studies of transcriptional regulators of the DeoR and GntR families involved in catabolic repression in Bacillus subtilis.	Řezáčová	Otwinowski Zbyszek, UT Southwestern Medical Cntr.. Dallas	USA	
7	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Izolace a identifikace biologicky aktivních organických látek z mechanicky aktivovaného	Cvačka	Zubrik A. Ústav geotechnik	Slovenská republika	

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Kordinátor/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
			slovenského hnědého uhlí/ Isolation and identification of biologically active organic compounds from mechanically activated Slovak brown coal		y SAV Košice		
8	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Spolupráce v oblasti energie a nanověd: USA a Evropa / Collaboration in Energy and Nanoscience)	Havlas	ČR/6 USA/9	USA	
9	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Teoretické studium struktury, dynamiky a funkce RNA a jejich vzájemných vztahů/ Theoretical investigation of RNA structure, dynamics and function and their relationship	Chocholoušová	Rob Knight, University of Colorado, Boulder	USA	
10	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Dvou a trojrozměrná pole molekulárních rotorů: Nové materiály pro nanotechnologie/ 2&3-D Arrays of Molecular Rotors:New Materials for Nanotechnology	Vacek	Josef Michl, University of Colorado, Boulder	USA	
11	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Chemie na atmosférických povrchích: Výzkum na molekulární úrovni pomocí laboratorních experimentů a	Roeselová	Barbara J. Finlayson- Pitts, Univ. of	USA	

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
			počítačových simulací/ Chemistry of atmospheric surfaces: Molecular level investigation using laboratory experiments and computer simulations		California, Irvine		
12	MŠMT	COST/ COST	Funkční proteomika obranných proteinů rostlin/ Functional proteomics of plant defense proteins	Nussbaumerová/ Mareš		COST akce "Plant proteomics in Europe" (EUPP)	
13	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Příprava homochirálních povrchů a souborů imobilizovaných funkčních molekul.	Starý	Laurence Raehm, Univ. Montpellier	Francie	
14	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Fotodisociace atmosféricky relevantních molekul adsorbovaných na povrchu ledu.	Roeselová	Celine Toubin Univ. des Sciences et Tech. de Lille	Francie	
15	UOCHB		Výzkumné centrum Gilead Sciences & UOCHB / Gilead Sciences & IOCB Research Centre	Antonín Holý		USA	Medicinální chemie a biochemie zaměřená k vývoji nových léčiv

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Koordinační/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
16	Rega Institute of Medical Research, Leuven	Spolupráce/ collaborative research	Testování protivirových látek / Antiviral screening	Prof. Jan Balzarini	Antonín Holý	Belgie	
17	ESF/Czech Science Foundation	EUROCORE S- EuroSCOPE & Czech Science Foundation	Interakce virových a hostitelských proteinů./Folding, Production and Assembly of Viral Complexes for High Resolution Structure Analysis	Iva Pichová/ Roman Tůma, University of Helsinki, Finland	Ineke Braakman Sarah Butcher Anna Mitraki Saskia van der Vies Mark van Raaij	Netherlands Finland France Netherlands Spain	Společný grant ESF
18	Sandler Family Supporting Foundation	Základní výzkum parazitických onemocnění/ Basic Research in Parasitic Diseases	Trávicí proteázy 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 antiparazitik
19	NSF	Collaborative Research, Spectroscopy	Excited State Dynamics of DNA Base-Pairs	M. de Vries	P. Hobza	USA	Publikační činnost

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
20	US NSF	AirUCI	Atmospheric integrated research for understanding chemistry at interfaces/Atmosférický integrovaný výzkum k porozumění chemie na rozhranních	Prof. Barbara Finlayson-Pitts, UC Irvine	P. Jungwirth/8	USA, Nový Zéland	Společný výzkum
21	ESF/Czech Science Foundation	EUROCORE S-EuroMEMBRANES	Molecular level physiology and pathology of oxidized phospholipids/Fyziologie a patologie oxidovaných fosfolipidů na molekulové úrovni	Prof. Paavo Kinnunen, University of Helsinki	P. Jungwirth/1	Finsko, Rakousko, SRN, VB, Švédsko, Dánsko	Společný výzkum
22	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Spektroskopické studie konformačního chování proteinů/ Spectroscopic Monitoring of Protein Folding	Bouř	University of Wyoming, Laramie, University of Illinois, Chicago, University of Tromsø	USA, Norsko	výzkum, vzdělávání
23	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Syntéza selektivně funkcionalizovaných polymerů a výzkum jejich interakcí s kovy./ Synthesis of selectively	Šrogl	University of N.Carolina, Raleigh	USA	výzkum

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
			functionalized polymers and investigation into their interactions with metals				
24	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Příprava nanofabrikovaných povrchů pro studium chemických a fyzikálních vlastností ukotvených molekul	Starý	University of Colorado, Boulder	USA	výzkum
25	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Nová antiparazitická chemoterapeutika: design, syntéza a testování	Horn	University of California San Francisco	USA	výzkum
26	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Complex Architectures of Polyolefins by Li <sup>+</sup> catalyzed Polymerization	Michl	MPG Mainz, GAU Goettingen	Německo	výzkum
27	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Rigidní cyklodextrinové duplexy jako divalentní spojky pro supramolekulární samoskladbu polymerů a organizovaných vrstev na površích	Kraus	University of Twente, Enschede	Holandsko	výzkum
28	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Cross-couplingová reakce organosirných látek. Oxidativní mobilizace kovového katalyzátoru./ Transition metal catalyzed cross-coupling	Šrogl	Emory University, Atlanta	USA	výzkum

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
			reactions of organosulfur compounds				
29	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Dvoudimenzionální separace proteinů pomocí výběrové ("heart-cutting") kapilární elektroforézy	Koval	Univ. de Montpellier	Francie	výzkum

**4b) akce s mezinárodní účastí, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spolupřadatel**

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	16. Evropské symposium o organické chemii	16th European Symposium on Organic Chemistry	ÚOCHB AV ČR (IOCB AS CR)	791 celkem, 720 z ciziny	Nejvýznamnější evropská konference v oboru, poprvé v České republice (Československu), účastníci z celého světa
2	34. kongres FEBS	34th FEBS Congress	ČSBMB/CSBMB	2000	

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
3	ISRIUM	ISRIUM, International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules	ÚOCHB/IOCB	80/74	
4	Bio-krystalografická konference HEC-12	12th Heart of Europe bio-Crystallography Meeting	Ústav molekulární genetiky AV ČR/Institute of Molecular Genetics AS CR	106/95	ANO
5	Česko-rakouský seminář o el. excitovaných stavech	Prague – Vienna workshop on electronically excited states	P. Hobza / H. Lischka	30	
6	Biologicky aktivní peptidy XI konference, Praha, Duben 22-24, 2009	Biologically Aktive Peptides XIth Conference, Praha, Apríl 22-24, 2009	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry Academy of Sciences of the Czech Republic	58/28	Hlaváček et al: Analogues of Orn and DAP as potential inhibitors of bacterial enzymes ArgE and DapE
7	Workshop „Vodivé polymery“, Loučeň, září 2009	Workshop on Conducting Polymers, Loučeň, September 2009	ÚOCHB/IOCB	60/20	Přednášející – špičky z oboru
8	Návštěva belgických studentů Grotte-Hogeschool Antwerpy	Visit of the belgian students	ÚOCHB/IOCB	20	
9	Konference Reaserch Connection	Research Connection Conference 2009	Evropská komise/European Commission	4	Představení ERC grantu J. Michla

4c) 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
	<b>Zvané přednášky:</b>			
1	Prof. Jürgen P. RABE	Elektronika s nanografy	Humboldt University, Berlin	Germany
2	Prof. Marko MIHOVILOVIC	Syntéza bioaktivních sloučenin	TU Wien	Austria
3	Prof. Walter THIEL	Teorie enzymatických reakcí	MPI für Kohlenforschung, Mülheim	Germany
4	Prof. Peter J. STANG	Biologická samoskladba	University of Utah, Salt Lake City	USA
5	Prof. Kurt WÜTHRICH	Strukturní biologie a genomika – využití NMR	Scrips Research Institute, La Jolla	USA
6	Prof. Lanny S. LIEBESKIND	Moderní organická syntéza	Emory University, Atlanta	USA
7	Prof. Carl H. SCHIESSER	Současná radikálová chemie	University of Melbourne, Parkville	Australia
8	Prof. George M. WHITESIDES	Přenos elektronu samoskladebnou monovrstvou	Harvard University, Cambridge	USA
9	Prof. Edward I. SOLOMON	Spektroskopické metody v bioanorganické chemii	Stanford University Kalifornie	USA
10	Prof. John R. MILLER	Delokalizace náboje v konjugovaných molekulách	Brookhaven National Laboratory, Upton	USA
11	Prof. Takuzo AIDA	Molekulární programování nanoarchitektury	University of Tokyo	Japan
12	Prof. Thomas E. MALLOUK	Nanostruktury ve fotokatalýze	Pennsylvania State University	USA
13	Prof. Henning HOPF	Interakce a reaktivita funkčních skupin	TU Braunschweig	SRN
14	Prof. Christian JOACHIM	Monomolekulární stroje	Center for Material Elaboration, Toulouse	Francie
	<b>Ostatní:</b>			
15	Dr. Valerie Alezra	Asymetrická syntéza	Universite Paris Sud, Orsay	Francie
16	Dr. Karl-Heinz Ernst	Nanověda, skenovací tunelová mikroskopie	EMPA, Dübendorf	Švýcarsko
17	Prof. Yujiro Hayashi	Enantioselektivní organokatalýza	Tokyo University of Science	Japonsko
18	Prof. Peter Kutschy	Syntéza biologicky aktivních látek	Univerzita P. J. Šafárika v Košicích	Slovensko
19	Dr. Gwenaél Rapenne	Nanověda, molekulární zařízení	CEMES CRNS Toulouse	Francie
20	Prof. Marek Szymonski	Nanověda, skenovací tunelová mikroskopie	Jagiellonian University, Krakow	Polsko
21	Prof. Yoshito Tobe	Sloučeniny bohaté na uhlík, samoskladba, mikroskopie atomárních sil	Osaka University	Japonsko

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
22	Prof. S. Thorimbert	Organicko-anorganické hybridní materiály	Pierre & Marie Curie University, Paris	Francie
23	Prof. Jörg Grunenberg	Teoretická chemie, výpočetní chemie	Technische Universität Braunschweig	SRN
24	Prof. T. Durand	Oxidativní stres, metabolity lipidů	Faculte de Pharmacie, Univ. Montpellier 1	Francie
25	Prof. Jean Martinez	Ředitel vědeckého ústavu, organická chemie a farmakologie	CNRS a Faculté de Pharmacie, Université de Montpellier	Francie
26	Prof. Michael J. Kuhar	Špičkový vědec, biochemie a farmakologie	Emory University, Atlanta	USA.
27	Dr. Kenneth Ruud	Informatika, kvantová chemie	University of Tromso	Norsko
28	Dr. Dage Sundholm	Výpočetní chemie	University of Helsinki	Finsko
29	Prof. Agnieszka Bronowska	Teoretická chemie, výpočetní chemie	University of Heidelberg	SRN
30	Prof. Klaus Muller-Dethlefs	Teoretická chemie, výpočetní chemie	University of Manchester	UK
31	Dr. Kevin Riley	Informatika, kvantová chemie	University of Puerto Rico	USA
32	Prof. Wolfgang Kraemer	Teoretická chemie, výpočetní chemie	MPI Garching	SRN
33	Prof. Carlos Otero Arean	Výpočetní chemie	Universidad de las Islas Baleares	Španělsko
34	Dr. Martin Korth	Výpočetní chemie	University of Cambridge	UK
35	Prof. Hans Lischka	Teoretická chemie, výpočetní chemie	University of Vienna	Rakousko
36	Prof. Wiktor Zierkiewicz	Výpočetní chemie	Wroclaw University	Polsko
37	Prof. Jim Lisy	Fyzikální chemie	University of Illinois	USA
38	Prof. Dor Ben-Amotz	Fyzikální chemie	Purdue University	USA
39	Prof. Barbara Kirchner	Teoretická chemie	University of Leipzig	SRN
40	Dr. Daniela Ascenzi	Fyzika, iontové reakce	Univ. of Trento	Itálie
41	Prof. Stephen D. Price	Fyzikální chemie	University College London	UK
42	Jean Martinez	Předseda European Peptide Society	Universite Montpellier	Francie
43	David Andreu	Sekretář European Peptide Society	Pompeu Fabra University Barcelona	Španělsko
44	Prof. Pierre Rasmont	Biolog, autorita v oboru taxonomie včelovitého hmyzu	Université Mons	Belgie
45	Dr. Gabriel Peltre	Přední světový odborník v oblasti separačních a imunochemických metod,	Ecole Supérieure de Physique et Chimie Industrielles (ESPCI), Paris	Francie

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
		zakladatel Francouzské elektroforetické společnosti		
46	Prof. Herve Cottet	Přední světový odborník v oblasti elektroseparačních metod	Université de Montpellier 1 et 2, Montpellier	Francie
47	Prof. Kari Ahonen	NMR spektroskopie v pevné fázi	University Jyväskylä	Finsko
48	Prof. A. M. Cook	Studium metabolických drah taurinu	Univ. Konstanz	SRN

#### 4d) aktuální meziústavní dvoustranné dohody

1 Číslo	2 Spolupracující instituce	3 Stát	4 Oblast (téma) spolupráce
1	Ústav experimentální medicíny AVČR, RNDr. Zdeněk Zídek	ČR	Výzkum imunomodulační aktivity látek
2	Institute of Parasitology, Biology Centre of the Academy of Sciences, České Budějovice, RNDr. Alena Zíková, PhD.	ČR	Látky proti Trypanosoma brucei a Trypanosoma leishmania
3	North Carolina State University, Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Raleigh	USA	Výzkum a syntéza funkčních polymerů a polymerních materiálů
4	Max-Planck-Institut für Chemische Ökologie Jena	Germany	Investigation of Triene Insect Pheromones
5	Maďarská akademie věd, Institut klinické medicíny (Dr. C. Telete), Budapešť	Maďarsko	Biochemie a imunohistochemie
6	Novo Nordisk	Dánsko	CART peptid, biochemie2
7	Max Planck Institute for Physics of Complex Systems Dresden	SRN	Mezinárodní postgraduální škola
8	Max Planck Institute for Chemical Ecology, Jena	SRN	Biosyntéza hmyzích feromonů

## 5. Seznam citací

1. Shroff, R. - Rulíšek, L. - Doubský, J. – Svatoš A.: Acid– base-driven matrix-assisted mass spectrometry for targeted metabolomics. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A , Roč. 106, č. 25 (2009), s. 10092-10096.
2. Klusák, V. - Bařinka, C. - Plechanovová, A. - Mlčochová, P. - Konvalinka, J. - Rulíšek, L. - Lubkowski, J.: Reaction mechanism of glutamate carboxypeptidase II revealed by mutagenesis, X-ray crystallography and computational methods. Biochemistry, Roč. 48, č. 19 (2009), s. 4126-4138.
3. Srnec, M. - Aquilante, F. - Ryde, U. - Rulíšek, L.: Reaction mechanism of manganese superoxide dismutase studied by combined quantum and molecular mechanical calculations and multiconfigurational methods. J. Phys. Chem. B, Roč. 113, č. 17 (2009), s. 6074-6086.
4. Auvinet, A. L. - Eignerová, B. - Guy, A. - Kotora, M. - Durand, T.: Total synthesis of 4-F3t-neuroprostane and its 4-epimer. Tetrahedron Letters, Roč. 50, č. 13 (2009), s. 1498-1500.
5. Čerňová, M. - Pohl, R. - Hocek, M.: Switching the regioselectivity of direct C-H arylation of 1,3-dimethyluracil. European Journal of Organic Chemistry, 2009, -, č. 22, s. 3698-3701.
6. Eignerová, B. - Slavíková, B. - Buděšínský, M. - Dračínský, M. - Klepetářová, B. - Šťastná, E. - Kotora, M.: Synthesis of fluorinated brassinosteroids based on alkene cross-metathesis and preliminary biological assessment. Journal of Medicinal Chemistry, Roč. 52, č. 18 (2009), s. 5753-5757.
7. Hasník, Z. - Pohl, R. - Hocek, M.: Cross-coupling Reactions of Halopurines with Aryl- and Alkyltrifluoroborates. The Scope and Limitations in the Synthesis of Modified Purines. Synthesis, 2009, -, č. 8, s. 1309-1377.
8. Hasník, Z. ; Pohl, R. ; Klepetářová, B. ; Hocek, M. Synthesis of (purin-6-yl)acetates and their transformations to 6-(2-hydroxyethyl)- and 6-(carbamoylmethyl)purines. Collection of Czechoslovak Chemical Communications, Roč. 74, č.7/8 (2009), s. 1035-1059.
9. Hrdina, R. - Opekar, F. - Roithová, J. - Kotora, M.: Neutral and ionic reaction mechanisms for allylation of aldehydes by bipyridine N,N'-dioxides. Chemical Communications, 2009, -, č. 17, s. 2314-2316.
10. Janková, Š. - Císařová, I. - Uhlík, F. - Štěpnička, P. - Kotora, M.: Synthesis and characterisation of Dewar benze-ferrocene conjugates. Dalton Transactions, 2009, -, č. 17, s. 3137-3139.
11. Kadlčíková, A. - Kotora, M.: Cross-cyclotrimerization with two nitriles as a pathway to synthesis of unsymmetrically 3,3'-disubstituted bis(tetrahydroisoquinolines). Molecules, Roč. 14, č. 8 (2009), s. 2918-2926.

12. Kadlčíková, A. - Hrdina, R. - Valterová, I. - Kotora, M.: Simple and Fast Synthesis of New Axially Chiral Bipyridine N,N'-Dioxides for Highly Enantioselective Allylation of Aldehydes. *Advanced Synthesis & Catalysis*, Roč. 351, č. 9 (2009), s. 1279-1283.
13. Kalachová, L. - Pohl, R. - Hocek, M.: Synthesis of 2'-deoxyuridine and 2'-deoxycytidine nucleosides bearing bipyridine and terpyridine ligands in position 5. *Synthesis*, 2009, -, č. 1, s. 105-112.
14. Klečka, M. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: Direct C-H borylation and C-H arylation of pyrrolo[2,3-d]pyrimidines: Synthesis of 6,8-disubstituted 7-deazapurines. *Organic & Biomolecular Chemistry*, Roč. 7, č. 5 (2009), s. 866-868.
15. Korotvička, A. - Hybelbauerová, S. - Kotora, M.: Synthesis of trans-fused sesquiterpenoid analogues by zirconocene-mediated metallo-ene reaction. *Synlett*, 2009, -, č. 15, s. 2445-2448.
16. Macíčková-Cahová, H. - Hocek, M.: Cleavage of adenine-modified functionalized DNA by type II restriction endonucleases. *Nucleic Acids Research*, Roč. 37, č. 22 (2009), s. 7612-7622.
17. Nauš, P. - Hocek, M.: Novel cytostatic 7-deazapurine nucleosides. Patentová přihláška: WO2009089804.
18. Nauš, P. - Pohl, R. - Votruba, I. - Džubák, P. - Hajdúch, M. - Ameral, R. - Birkuš, G. - Wang, T. - Ray, A. S. - Mackman, R. - Cihlar, T. - Hocek, M.: 6-(Het)aryl-7-Deazapurine Ribonucleosides as Novel Potent Cytostatic Agents. *Journal of Medicinal Chemistry*, Roč. 53, č.1 (2010) s. 460-470.
19. Novák, P. - Kotora, M.: Rh- and Ru-complex-catalyzed dimerization of arylethyne in aqueous environment. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, Roč. 74, č. 3 (2009), s. 433-442.
20. Riedl, J. - Horáková, P. - Šebest, P. - Pohl, R. - Havran, L. - Fojta, M. - Hocek, M.: Tetrathiafulvalene-labelled nucleosides and nucleoside triphosphates. Synthesis, electrochemistry and scope of their polymerase incorporation into DNA. *European Journal of Organic Chemistry*, 2009, -, č. 21, s. 3519-3525.
21. Štambaský, J. - Hocek, M. - Kočovský, P.: C-Nucleosides: Synthetic Strategies and Biological Applications. *Chemical Reviews*, 2009, Roč. 109, -, s. 6729-6764.
22. Štefko, M. - Pohl, R. - Hocek, M.: Synthesis of benzamide C-ribonucleosides by Pd-catalyzed aminocarbonylations. *Tetrahedron*, Roč. 65, č. 23 (2009), s. 4471-4483.
23. Urban, M. - Joubert, N. - Hocek, M. - Alexander, R. E. - Kuchta, R. D. Herpes Simplex Virus-1 DNA Primase: A Remarkably Inaccurate yet Selective Polymerase. *Biochemistry*, Roč. 48, č. 46 (2009), s. 10866-10881.
24. Vrábel, M. - Horáková Brázdilová, P. - Pivoňková, H. - Kalachová, L. - Černocká, H. - Cahová, H. - Pohl, R. - Šebest, P. - Havran, L. - Hocek, M. - Fojta, M.: Base-modified DNA labeled by [Ru(bpy)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup> and [Os(bpy)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup> complexes: construction by polymerase incorporation of modified nucleoside triphosphates, electrochemical and luminescent properties, and applications. *Chemistry - A European Journal*, Roč. 15, č. 5 (2009), s. 1144-1154.
25. Zendlová, L. - Řeha, D. - Hocek, M. - Hobza, P.: Theoretical study of the stability of the DNA duplexes modified by a series of hydrophobic base analogues. *Chemistry - A European Journal*, Roč. 15, č. 31 (2009), s. 7601-7610.
26. Keough, D.T. - Hocková, D. - Holý, A. - Naesens, L. - Skinner-Adams, T.S. - De Jersey, J. - Guddat, L.W.: Inhibition of hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase by acyclic nucleoside phosphonates: A new class of antimalarial therapeutics. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 52, č. 14 (2009), s. 4391-4399.
27. Hocková, D. - Holý, A. - Masojídková, M. - Keough, D.T. - De Jersey, J. - Guddat, L.W.: Synthesis of branched 9-[2-(2-phosphonoethoxy)ethyl]purines as a new class of acyclic nucleoside phosphonates which inhibit Plasmodium falciparum

- hypoxanthine-guanine-xanthine phosphoribosyltransferase. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. Roč. 17, č. 17 (2009), s. 6218-6232.
28. 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*. Roč. 74, č. 3 (2009), s. 469-485.
  29. 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*. Roč. 74, č. 3 (2009), s. 487-502.
  30. Hřebabecký, H. – Dračínský, M. – Holý, A.: New carbocyclic nucleoside analogues built on a bicyclo[2.2.2]octane-2,2dimethanol template. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Roč. 74, č. 9 (2009), s. 1425-1441.
  31. Šála, M. – Hřebabecký, H. – Dračínský, M. – Masojídková, M. - De Palma, A.M. – Neyts, J. – Holý, A.: Norbornane as the novel pseudoglycone moiety in nucleosides. *Tetrahedron*. Roč. 65, č. 45 (2009), s. 9291-9299.
  32. Doláková, P. – Dračínský, M.- Masojídková, M. – Šolíňová, V. – Kašička, V. – Holý, A.: Acyclic nucleoside bisphosphonates: Synthesis and properties of chiral 2-amino-4,6-bis[(phosphonomethoxy)alkoxy]pyrimidines. *European Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 44, č. 6 (2009), s. 2408-2424.
  33. Doláková, P. – Dračínský, M. – Fanfrlík, J. – Holý, A.: Synthesis of analogues of acyclic nucleoside diphosphates containing a (phosphonomethyl)phosphanyl moiety and studies of their phosphorylation. *European Journal of Organic Chemistry*. -, č. 7 (2009), s. 1082-1092.
  34. Pomeisl, K. – Holý, A. – Pohl, R. – Horská, K.: Use of Pd-catalyzed Suzuki-Miyaura coupling reaction in the rapid synthesis of 5-aryl-6-(phosphonomethoxy)uracils and evaluation of their inhibitory effect towards human thymidine phosphorylase. *Tetrahedron*. Roč. 65, č. 41 (2009), s. 8486-8492.
  35. Sehnal, P. - Stará, I. G. - Šaman, D. - Tichý, M. - Míšek, J. - Cvačka, J. - Rulíšek, L. - Chocholoušová, J. - Vacek, J. - Goryl, G. - Szymonski, M. - Císařová, I. - Starý, I.: An organometallic route to long helicenes. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*. Roč. 106, č. 32 (2009), s. 13169-13174.
  36. Šámal, M. - Míšek, J. - Stará, I. G. - Starý, I.: Organocatalysis with Azahelicenes: The First Use of Helically Chiral Pyridine-Based Catalysts in the Asymmetric Acyl Transfer Reaction. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Roč. 74, č. 7-8 (2009), s. 1151-1159.
  37. Starý, I. - Stará, I. G.: Helicenes. *Strained Hydrocarbons*. Weinheim: Wiley-VCH, 2009 - (Dodziuk, H.) s. 166-176.
  38. Voltrová, S., Šrogl, J. Copper/Ascorbic Acid Dyad as a Catalytic System for Selective Aerobic Oxidation of Amines. *Org. Lett.* Roč. 11 (2009), s. 843-845.
  39. Šrogl, J., Hývl, J., Révész, A., Schröder D.: Mechanistic Insights into a Copper-Disulfide Interaction in Oxidation of Imines by Disulfides *Chem. Commun* (2009), s. 3463-3465.
  40. Jahn, U. - Dinca, E.: Total Synthesis of 15-F2t-Isoprostane by Using a New Oxidative Cyclization of Distonic Radical Anions as the Key Step. *Chem. Eur. J.* Roč.15, (2009), s. 58-62.

41. Zöllner, M. J. - Jahn, U. - Becker, E. - Kowalsky, W. - Johannes, H.-H.: Simplified methods for the functionalisation of 3-hexoxythiophenes at the 5-position and further reactions to alkynyl and vinyl derivatives. *Chem. Commun.* (2009), s. 565-567.
42. Ford, L. - Jahn, U.: Radicals and Transition-Metal Catalysis: An Alliance Par Excellence to Increase Reactivity and Selectivity in Organic Chemistry. *Angew. Chem. Int. Ed. Roč. 48*, (2009), s. 6386-6389.
43. Jahn, U. - Kafka, F. - Pohl, R. - Jones, P. G.: N,3,4-Trisubstituted pyrrolidines by electron transfer-induced oxidative cyclizations of N-allylic  $\beta$ -amino ester enolates. *Tetrahedron Roč. 65*, (2009), s.10917-10929.
44. Jahn, U.: N-Nitroamines. *Science of Synthesis*, Thieme Verlag: Stuttgart, (K. Banert), 2009, Vol. 41, pp. 371-436.
45. Cherkupally, P. – Beier, P.: A novel alkoxide-induced nucleophilic trifluoromethylation of carbonyl compounds, disulfides and diselenides using diethyl trifluoromethylphosphonate *Tetrahedron Lett. Roč. 51*, č. 2 (2010), s. 252–255.
46. Adriaenssens, L. - Severa, L. - Vávra, J. - Šálová, T. - Hývl, J. - Čížková, M. - Pohl, R. - Šaman, D. - Teplý, F.: Bio- and air-tolerant carbon–carbon bond formations via organometallic ruthenium catalysis. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications. Roč. 74*, 7/8 (2009), s. 1023-1034.
47. Adriaenssens, L. - Severa, L. - Šálová, 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. *Chemistry - A European Journal. Roč. 15*, č. 5 (2009), s. 1072-1076.
48. Severa, L. - Vávra, J. - Kohoutová, A. - Čížková, M.- Šálová, T. - Hývl, J. - Šaman, D. - Pohl, R. - Adriaenssens, L. - Teplý, F. Air-tolerant C–C bond formation via organometallic ruthenium catalysis: diverse catalytic pathways involving (C5Me5)Ru or (C5H5)Ru are robust to molecular oxygen. *Tetrahedron Letters. Roč. 50*, č. 31 (2009), s. 4526-4528.
49. Pospíšil, L. - Teplý, F. – Gál, M. – Adriaenssens, L. – Horáček, M. – Severa, L.: Helquats, novel helical extended diquats as fast electron transfer systems. *Physical Chemistry Chemical Physics* (2010), v tisku, DOI:10.1039/B915148F.
50. Andronova, A. - Szydło, F. - Teplý, F. - Tobrmanová, M. - Volot, A. - Stará, I. - Starý, I. - Rulíšek, L. - Šaman, D. - Cvačka, J. - Fiedler, P. - Vojtíšek, P.: The Quest for alternative routes to racemic and nonracemic azahelicene derivatives. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications. Roč. 74*, č. 1 (2009), s. 189-215.
51. Vaněk, V. - Budešínský, M. - Kabeleová, P. - Šanda, M. - Kožíšek, M. - Hančlová, I. - Mládková, J. - Brynda, J. - Rosenberg, I. - Koutmos, M. - Garrow, T. A. - Jiráček J.: Structure-Activity Study of New Inhibitors of Human Betaine-Homocysteine S-Methyltransferase. *Journal of Medicinal Chemistry. Roč 52*, č. 12 (2009), s. 3652-3665.
52. Matyšková, R. - Železná, B. - Maixnerová, J. - Koutová, D. - Haluzík, M. – Maletínská, L.: Estradiol Supplementation Helps Overcome Central Leptin Resistance of Ovariectomized Mice on a High Fat Diet. *Hormone and Metabolic Research.* (2009). V tisku.
53. Michl, J. - Sykes, E. C. H.: Molecular rotors and motors: Recent advances and future challenges. *ACS NANO. Roč. 3*, č. 5 (2009), s. 1042-1048..
54. Mulcahy, M. E. - Magnera, T. F. - Michl, J.: Molecular rotors on Au(111): Rotator orientation from IR spectroscopy. *Journal of Physical Chemistry C. Roč. 113*, č. 48 (2009), s. 20698-20704.
55. Oliva, J. M. - Andrés, L. S. - Havlas, Z. - Michl, J.: On the electronic structure of a dianion, a radical anion, and a neutral biradical (HB)11C-C $\equiv$ C-C(BH)11 carborane dimer. *Journal of Molecular Structure. Theochem. Roč. 912*, 1/3 (2009), s. 13-20.

56. Oliva, J. M. - Andrés, L. S. – Klein, D. J. – Schleyer, P. R. – Michl J.: Design of Carborane Molecular Architectures via Electronic Structure Computations. *International Journal of Photoenergy*. Roč.2009, str.1-6, article ID 292393.
57. Kunetskiy, R.A.- Císařová, I.- Šaman, D. - Lyapkalo, I.M.: New Lipophilic 2-Amino-N,N'-dialkyl-4,5-dimethylimidazolium Cations: Synthesis, Structure, Properties and Outstanding Thermal Stability in Alkaline Media, *Chem. Eur. J.* Roč. 15 (2009), s. 9477–9485.
58. Lyapkalo, I.M.- Vogel, M.A.K. -Boltukhina, E.V.- Vavřík, J. :A General One-Step Synthesis of Alkynes from Enolizable Carbonyl Compounds. *Synlett* (2009), s. 558–561.
59. Kumprecht, L. - Buděšínský, M. - Vondrášek, J. - Vymětal, J. - Černý, J. - Císařová, I. - Brynda, J. - Herzig, V. - Koutník, P. - Závada, J. - Kraus, T.: Rigid duplex alpha-cyclodextrin reversibly connected with disulfide bonds. Synthesis and inclusion complexes. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 74, č. 3 (2009), s. 1082-1092.
60. Krejčí, L. - Buděšínský, M. - Císařová, I. - Kraus, T.: Tubular duplex alpha-cyclodextrin triply bridged with disulfide bonds: synthesis, crystal structure and inclusion complexes. *Chemical Communications*. č. 24 (2009), s. 3557-3559.
61. Kóšiová, I. - Točík, Z. - Buděšínský, M. - Šimák, O. - Liboska, R. - Rejman, D. - Pačes, O. - Rosenberg, I.: Methyl 4-toluenesulfonyloxymethylphosphonate, a new and versatile reagent for the convenient synthesis of phosphonate-containing compounds. *Tetrahedron Letters*. Roč. 50, č. 49 (2009), s. 6745-6747.
62. Rejman, D. - Kovačková, S. - Pohl, R. - Dračínský, M. - Fiedler, P. - Rosenberg, I.: A convenient, high-yield synthesis of 1-substituted uracil and thymine derivatives. *Tetrahedron*. Roč. 65, č. 41 (2009), s. 8513-8523.
63. Rejman, D. - Pohl, R. - Kočalka, P. - Masojídková, M. - Rosenberg, I.: Pyrrolidine N-alkylphosphonates and related nucleotide analogues: synthesis and stereochemistry. *Tetrahedron*. Roč. 65, č. 18 (2009), s. 3673-3681.
64. Vaněk, V. - Buděšínský, M. - Rinnová, M. - Rosenberg, I.: Prolinol-based nucleoside phosphonic acids: new isosteric conformationally flexible nucleotide analogues. *Tetrahedron*. Roč. 65, č. 4 (2009), s. 862-876.
65. Rejman, D. - Kočalka, P. - Pohl, R. - Točík, Z. - Rosenberg, I.: Synthesis and hybridization of oligonucleotides modified at AMP sites with adenine pyrrolidine phosphonate nucleotides. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Roč. 74, č. 6 (2009), s. 935-955.
66. Pressová, M. - Buděšínský, M. - Košiová, I. – Kopecký, V. - Cvačka, J. - Kašička, V. - Šimák, O. - Točík, Z. - Rosenberg, I.: Oligomerization of Adenosin 5'-O-ylmethylphosphonate, an Isopolar AMP Analogue: Evaluation of the Route to Short Oligoadenylates. *Biopolymers* 2009, accepted.
67. Točík, Z. - Buděšínský, M. - Barvík Jr., I. - Rosenberg, I.: Conformational evaluation of labeled C3'-O-P-13CH<sub>2</sub>-O-C4'' phosphonate internucleotide linkage, a phosphodiester isostere. *Biopolymers*. Roč. 91, č. 7 (2009), s. 514-529.
68. Šťastná, E. - Chodounská, H. - Pouzar, V. - Kapras, V. - Borovská, J. - Cais, O. - Vyklický ml., L.: Synthesis of C3, C5, and C7 pregnane derivatives and their effect on NMDA receptor responses in cultured rat hippocampal neurons. *Steroids*. Roč. 74, č. 2 (2009), s. 256-263.
69. Eignerová, B. - Slavíková, B. - Buděšínský, M. - Dračínský, M. - Klepetářová, B. - Šťastná, E. - Kotora, M.: Synthesis of fluorinated brassinosteroids based on alkene cross-metathesis and preliminary biological assessment. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 52, č. 18 (2009), s. 5753-5757.

70. Černý, I. - Buděšínský, M. - Pouzar, V. - Drašar, P.: Steroids linked with amide bond - extended cholesterol. *Steroids*. Roč. 74, č. 1 (2009), s. 88-94.
71. Simerský, R. - Novák, O. - Morris, D. - Pouzar, V. - Strnad, M.: Identification and Quantification of Several Mammalian Steroid Hormones in Plants by UPLC-MS/MS. *Journal of Plant Growth Regulation*. Roč. 28, č. 2 (2009), s. 125-136.
72. Slavíková, B. - Krištofiková, Z. - Chodounská, H. - Buděšínský, M. - Durán, F. J. - Veleiro, A. S. - Burton, G. - Kasal, A.: Allopregnanolone (3alpha-Hydroxy-5alpha-pregnan-20-one) Derivatives with a Polar Chain in position 16alpha: Synthesis and activity. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 52, č. 7 (2009), s. 2119-2125.
73. Grantz Šašková, K. - Kožíšek, M. - Řezáčová, O. - Brynda, J. - Yashina, T. - Kagan, R. M. - Konvalinka, J.: Molecular Characterization of Clinical Isolates of Human Immunodeficiency Virus Resistant to the Protease Inhibitor Darunavir. *Journal of Virology*. Roč. 83, č. 17 (2009), s. 8810-8818.
74. Klusák, V. - Bařinka, C. - Plechanovová, A. - Mlčochová, P. - Konvalinka, J. - Rulíšek, L. - Lubkowski, J.: Reaction mechanism of glutamate carboxypeptidase II revealed by mutagenesis, X-ray crystallography and computational methods. *Biochemistry*. Roč. 48, č. 19 (2009), s. 4126-4138.
75. Hrušková, O. - Dostál, J. - Majer, F. - Havlíková, J. - Hradílek, M. - Pichová, I.: Two aspartic proteinases secreted by the pathogenic yeast *Candida parapsilosis* differ in expression pattern and catalytic properties. *Biological Chemistry*. Roč. 390, č. 3 (2009), s. 259-268.
76. Dostál, J. - Brynda, J. - Hrušková, O. - Siegllová, I. - Pichová, I. - Řezáčová, P.: The crystal structure of the secreted aspartic protease 1 from *Candida parapsilosis* in complex with pepstatin A. *Journal of Structural Biology*. Roč. 167, č. 2 (2009), s. 145-152.
77. Macek, P. - Chmelík, J. - Křížová, I. - Kadeřávek, P. - Padrta, P. - Zídek, L. - Wildová, M. - Hadravová, R. - Chaloupková, R. - Pichová, I. - Ruml, T. - Rumlová, M. - Sklenář, V.: NMR structure of the N-terminal domain of capsid protein from the mason-pfizer monkey virus. *J. Mol. Biol.* Roč. 392, č. 1 (2009), s. 100-114.
78. Zábranský, A. - Hadravová, R. - Štokrová, J. - Sakalian, M. - Pichová, I.: Premature processing of mouse mammary tumor virus Gag polyprotein impairs intracellular capsid assembly. *Virology*. Roč. 384, č. 1 (2009), s. 33-37.
79. Snášel, J. - Rosenberg, I. - Pačes, O. - Pichová, I.: Mapping of HIV-1 integrase preferences for target site selection with various oligonucleotides. *Arch Biochem Biophys*. Roč. 488, č. 2 (2009), s. 153-162.
80. Horn, M. - Nussbaumerová, M. - Šanda, M. - Kovářová, Z. - Srba, J. - Franta, Z. - Sojka, D. - Bogyo, M. - Caffrey, C. R. - Kopáček, P. - Mareš, M.: Hemoglobin digestion in blood-feeding ticks: mapping of multi-peptidase pathway by functional proteomics. *Chemistry & Biology*. Roč. 16, č. 10 (2009), s. 1053-1063.
81. Pytelková, J. - Hubert, J. - Lepšík, M. - Šobotník, J. - Šindelka, R. - Křížková, I. - Horn, M. - Mareš, M.: Digestive alpha-amylases of the flour moth *Ephestia kuehniella* - adaptation to alkaline environment and plant inhibitors. *FEBS Journal*. Roč. 276, č. 13 (2009), s. 3531-3546.
82. Dračínský, M. - Kaminský, J. - Bouř, P.: Structure of the Alanine Hydration Shell as Probed by NMR Chemical Shifts and Indirect Spin-Spin Coupling. *J. Phys. Chem. B*. Roč. 113 (2009), s. 14698-14707.

83. Šebek, J.- Kapitán, J.- Šebestík, J.- Baumruk, V.- Bouř, P.: L-Alanyl-L-alanine Conformational Changes Induced by pH As Monitored by the Raman Optical Activity Spectra. *J. Phys. Chem. A*. Roč. 113 (2009), s. 7760–7768.
84. Andrushchenko, V.- Matějka, P.- Anderson, D. T.- Kaminský, J.- Horníček, J.- Paulson, L. O.- Bouř, P.: Solvent Dependence of the N-Methylacetamide Structure and Force Field. *J. Phys. Chem. A*. Roč. 113 (2009), s. 9727-9736.
85. Kaminský, J.- Kapitán, J.- Baumruk, V.- Bednářová, L.- Bouř, P.: Interpretation of Raman and Raman Optical Activity Spectra of a Flexible Sugar Derivative, the Gluconic Acid Anion. *J. Phys. Chem.* Roč. 113 (2009), s. 3594-3601.
86. Řezáčová, P. - Pokorná, J. - Brynda, J. - Kožíšek, M. - Cígler, P. - Lepšík, M. - Fanfrlík, J. - Řezáč, T. - Grantz Šašková, K. - Siegllová, I. - Plešek, J. - Šícha, V. - Grüner, B. - Oberwinkler, H. - Sedláček, J. - Kräusslich, H. G. - Hobza, P. - Král, V. - Konvalinka, J.: Design of HIV protease inhibitors based on inorganic polyhedral metallacarboranes. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 52, č. 22 (2009), s. 7132-7141.
87. Hobza, P. – Mueller Dethlefs, K.: *Non-Covalent Interactions (Theory and Experiment)*, Royal Society of Chemistry, Theoretical and Computational Chemistry Series, ISBN: 978-1-84755-853-4, Cambridge, 2009
88. Řezáč, J. - Fanfrlík, J. - Salahub, D. – Hobza, P.: Semiempirical Quantum Chemical PM6 Method Augmented by Dispersion and H-Bonding Correction Terms Reliably Describes Various Types of Noncovalent Complexes, *Journal of Chemical Theory and Computation*. Roč. 5, č. 7 (2009), s. 1749-1760. ISSN 1549-9618
89. Pitoňák, M. - Janowski, T. - Neogrády, P. - Pulay, P. – Hobza, P.: Convergence of the CCSD(T) Correction Term for the Stacked Complex Methyl Adenine-Methyl Thymine: Comparison with Lower-Cost Alternatives, *Journal of Chemical Theory and Computation*. Roč. 5, č. 7 (2009), s. 1761-1766. ISSN 1549-9618.
90. Slavíček, P.; Winter, B.; Faubel, M.; Bardforth, S. E.; Jungwirth, P.: Ionization energies of aqueous nucleic acids: Photoelectron spectroscopy of pyrimidine nucleosides and ab initio calculations. *Journal of the American Chemical Society* Roč. 131(2009), s. 6460-6467.
91. Vácha, R.; Berkowitz, M. L.; Jungwirth, P. Molecular model of a cell plasma membrane with asymmetric multicomponent composition: Water permeation and ion effects. *Biophysical Journal*, Roč. 96 (2009), s. 44493.
92. Vácha, R.; Siu, S. W. I.; Petrov, M.; Bockmann, R. A.; Barucha-Kraszewska, J.; Jurkiewicz, P.; Hof, M.; Berkowitz, M. L.; Jungwirth, P.: Effects of alkali cations and halide anions on the DOPC lipid membrane. *Journal of Physical Chemistry A*, Roč. 113 (2009), s. 7235.
93. Roithová, J. - Schröder, D.: Silicon compounds of neon and argon. *Angewandte Chemie International Edition*. Roč. 48, č. 46 (2009), s. 8788-8790.
94. Čeřovský, V. - Buděšinský, M. - Hovorka, O. - Cvačka, J. - Voburka, Z. - Slaninová, J. - Borovičková, L. - Fučík, V. - Bednářová, L. - Votruba, I. - Straka, J.: Lasioglossins: Three novel antimicrobial peptides from the venom of the eusocial bee *Lasioglossum laticeps* (Hymenoptera: Halictidae). *Chembiochem*. Roč. 10, č. 12 (2009), s. 2089-2099.
95. Čeřovský, V. - Žďárek, J. - Fučík, V. - Monincová, L. - Voburka, Z. - Bém, R. Lucifensin, the long-sought antimicrobial factor of medicinal maggots of the blowfly *Lucilia sericata*. *Cellular and Molecular Life Sciences* 2009 DOI 10.1007/s00018-009-0194-0.
96. Kalinová, B. - Podskalská, H. - Růžička, J. - Hoskovec, M.: Irresistible bouquet of death - how are burying beetles (Coleoptera: Silphidae: Nicrophorus) attracted by carcasses. *Naturwissenschaften*. Roč. 96, č. 8 (2009), s. 889-899.

97. Podskalská, H. - Růžička, J. - Hoskovec, M. - Šálek, M.: Use of infochemicals to attract carrion beetles into pitfall traps. *Entomologia Experimentalis et Applicata*. Roč. 132, č. 1 (2009), s. 59-64.
98. Šolínová, V. – Kašička, V. – Sázelová, P. – Holý, A.: Chiral analysis of anti-acquired immunodeficiency syndrome drug, 9-(R)-[2-(phosphonomethoxy)propyl]adenine (tenofovir), and related antiviral acyclic nucleoside phosphonates by CE using  $\beta$ -CD as chiral selector, *Electrophoresis*. Roč. 30 (2009), s. 2245-2254.
99. Ehala, S. – Dybal, J. – Makrlík, E. – Kašička, V.: Capillary electrophoretic and computational study of the complexation of valinomycin with rubidium cation, *Electrophoresis*. Roč. 30 (2009), s. 883-889.
100. Ehala, S. – Dybal, J. – Makrlík, E. – Kašička, V.: Capillary affinity electrophoresis and ab initio calculation studies on complexation of valinomycin with Na<sup>+</sup> ion. *Journal of Separation Sciences*. Roč. 32 (2009), s. 597-604.
101. Ehala, S. – Dybal, J. – Makrlík, E. – Kašička, V.: Application of capillary affinity electrophoresis and density functional theory to the investigation of valinomycin-lithium complex, *Journal of Chromatography A*. Roč. 1216 (2009), 3660-3665.
102. Kašička, V. – Ehala, S. – Šolínová, V. – Schimperková, T. – Sázelová, P. – Koval, D.: Investigation of peptide complexes with small cations and cyclodextrins by capillary affinity electrophoresis. In Slaninová, J. (Ed.): *Biologically Active Peptides, Proceedings of the XIth Conference, Prague, CR, 22-24.4.2009. Collection – Symposium Series*. Roč. 11 (2009), s. 55-58.
103. Dračinský, M. – Holý, A. – Jansa, P. – Kovačková, S. – Buděšínský, M.: Isotopic exchange of hydrogen at C-5 in pyrimidine derivatives – tautomers with sp<sup>3</sup>-hybridised C-5 carbon atom. *European Journal of Organic Chemistry*. Roč. 2009, č. 24, s.4117-4122.
104. Dračinský, M. – Cvačka, J. – Semanská, M. – Martínek, V. – Frei, E. – Stiborová, M.: The mechanism of formation of (deoxy)guanosine adducts derived from peroxidase-catalyzed oxidation of the carcinogenic non-aminoazo dye 1-phenylazo-2-hydroxynaphtalene (Sudan I). *Chemical Research in Toxicology*. Roč. 22, č. 11 (2009), s. 1765-1773.
105. Nováková, M. – Macková, M. – Chrastilová, Z. – Prokešová, J. – Szekeres, M. – Demnerová, K. – Macek, T.: Cloning the Bacterial bphC Gene into *Nicotiana tabacum* to Improve the Efficiency of PCB Phytoremediation. *Biotechnology and Bioengineering*. Roč. 102 (2009), s. 29-37.
106. Uhlík, O. – Ječná, K. – Macková, M. – Vlček, Č. – Hroudová, M. – Demnerová, K. – Pačes, V. – Macek, T.: Biphenyl-Metabolizing Bacteria in the Rhizosphere of Horseradish and Bulk Soil Contaminated by Polychlorinated Biphenyls as Revealed by Stable Isotope Probing. *Applied and Environmental Microbiology*. Roč. 75 (2009), s. 6471–6477.
107. Sylvestre, M. – Macek, T. – Macková, M.: Transgenic plants to improve rhizoremediation of polychlorinated biphenyls (PCBs). *Current Opinion in Biotechnology*. Roč. 20 (2009), s. 1-6.
108. Uhlík, O. – Ječná, K. – Leigh, M.B. – Macková, M. - Macek T.: DNA-based stable isotope probing: a link between community structure and function. *Science of the Total Environment*. Roč. 407 (2009), 3611-3619.
109. Macková, M. – Prouzová, P. – Štursa, P. – Ryšlavá, E. - Uhlík, O. - Beranová, K. - Rezek, J. - Kurzawová, V. - Demnerová, K. - Macek T.: Phyto/rhizoremediation studies using long-term PCB-contaminated soil. *Environmental Science and Pollution Research* Roč. 16 (2009), s. 817- 829.
110. Kotrba, P. – Najmanova, J. – Macek, T. – Ruml, T. – Mackova, M.: Genetically modified plants in phytoremediation of heavy metal and metalloids soil and sediment pollution. *Biotechnology Advances*. Roč. 27 (2009), s. 799-810.

111. 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. *International Journal of Phytoremediation*. Roč. 11, (2009), s. 66-81.
112. Štursa, P. – Uhlík, O. – Kurzawová, V. – Koubek, J. – Ionescu, M. – Strohalm, - M. – Lovecká, P. – Macek, T. – Macková, M.: Approaches for diversity analysis of cultivable and non-cultivable bacteria in real soil. *Plant Soil and Environment*. Roč. 55, (2009), s. 389–396.
113. Ionescu, M. – Beranová, K. – Dudková, V. – Kochánková, L. –Demnerová, K. – Macek, T. – Macková, M.: Isolation and characterization of different plant associated bacteria and their potential to degrade polychlorinated biphenyls. *International Biodegradation and Biodeterioration*. Roč. 63, (2009), s. 667–672.
114. Hybelbauerová, S. – Sejbal, J. – Dračinský, M. – Radovská, I. - Koutek B.: Unusual p-coumarates from the stems of *Vaccinium myrtillus*. *Helvetica Chimica Acta*. Roč. 92, (2009), s. 2795-2801.
115. Macek, T. - Uhlík, O. - Ječná, M. - Nováková, M. - Lovecká, P. - Rezek, J. - Dudková, V. - Štursa, P. - Vrchotová, B. - Pavlíková, D. - Demnerová, K. – Macková, M.: Advances in phytoremediation and rhizoremediation. V knize: Singh, A. – Kuhad, R.C. – Ward, O.P. (Editoři), *Advances in Applied Bioremediation*. Springer, Berlin, (2009), s. 257-277.
116. Ledvina M.- Turánek J.- Miller A.D.-Hipler K. Compound (Adjuvants): PCT appl., WO 2009/11582 A2, 2009.
117. Ledvina M.- Zyka D.- Džoganová M.: Deriváty kyseliny glukosaminylmuramové, *Czech Appl. PV 2005-658*, 2005.

## 6. Popularizační a propagační činnost

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupřádatel	6 Datum a místo konání
1	Respekt	Článek. P. Jungwirtha – Jak řídit akademii	Respekt	leden
2	PORT ČT	. P. Jungwirth - reportáž	ČT	březen
3	Natáčení TV Nova	Vědecký seriál Vizita	Nova	duben
4	Reflex	Anketa Reflexu o osobnosti ve vědě	Reflex	duben
5	Týden	. J. Konvalinka – Rozumný virus nezabíjí - rozhovor	Týden	květen
6	Ekonom	A. Holý, P. Hobza – Vynalezeno v Česku - článek	Ekonom	květen
7	Chemical Engineering	M. Hocek, F. Teplý - rozhovor	Chemical	květen

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupřadatel	6 Datum a místo konání
			Engineering	
8	Belgická TV	Natačení/rozhovor – P. Řezáčová	Belgická TV	květen
9	Ekonom	J. Konvalinka – Trojčlenka „pomáhá“ financovat českou vědu - článek	Ekonom	červen
10	iHned, portál Týden, ČT24 Milénium	L. Rulíšek, A. Svatoš – Jak najít jehlu v kupce sena (nová metoda MAILD)	Max Planck Institute	červen
11	Kniha „Slavné stavby Prahy 6“	Fotografování objektu	Agentura FOIBOS	červen
12	MF Dnes	I. Hrdý - rozhovor	MF Dnes	červen
13	Ekonom	A. Holý, doc. J. Konvalinka –Geniální české mozky - článek	Ekonom	červenec
14	Nature	J. Konvalinka, P. Jungwirth, P. Hobza – Czech Researchers angry over government ganges	Nature	červenec
15	ČRo Vltava	Z. Havlas - rozhovor	ČRo Vltava	červenec
16	ČT24 Rendez-vous	Osobnosti české vědy jako hosté J. Konvalinky	ČT	6 dílů v r. 2009
17	ČT Rendez-vous	V. Pačes – host J. Konvalinky – pořad Rendez-vous	ČT	červenec
18	Aktuálně CZ	Z. Havlas – Chystá se zkáza vědy - rozhovor	Aktuálně CZ	červenec
19	Lidové noviny	Čestí vědci píší v Nature o financování výzkumu v ČR	Lidové noviny	srpen
20	Zdravotnické noviny	Látka GS 9219 – slibná, i když s otazníky – T. Cihlář	Zdravotnické noviny/Gilead	srpen
21	Hospodářské noviny	P. Jungwirth – Vědce bych dřív lákal k návratu – teď nevím. článek	Hospodářské noviny	srpen
22	Hospodářské noviny	J. Konvalinka – V bitvě o mozky míříme k debaklu - článek	Hospodářské noviny	srpen
23	ČT Rendez-vous	M. Hocek – host J. Konvalinky v pořadu Rendez-vous	ČT	září
24	Výstava Věda žije	Vernisáž – poster – léky A. Holého	KAV ČR	září
25	Výstava Slavné stavby Prahy 6	Vernisáž – foto ústavu + foto v knize	Agentura FOIBOS	září
26	Respekt	P. Jungwirth – Tucet otázek	Respekt	září
27	ČRo Leonardo	J. Konvalinka – Infekční nemoci opět na scéně – kulatý stůl	ČRo Leonardo	září
28	MF Dnes	I. Hrdý – Začínal jsem jako chovatel bourců morušových	MF Dnes	září
29	ČT1	Natáčení spotu pro EXPO 2010	ČT1	říjen

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupřádatel	6 Datum a místo konání
30	ČT Milénium	K. Grantz-Šašková – Podaří se zastavit postup viru HIV?	ČT Milénium	říjen
31	Týden vědy a techniky	L. Maletínská – Epidemie obezity a regulace příjmu potravy - přednáška	KAV ČR	listopad
32	ČTK	České „perly“ jimiž se ČR bude prezentovat na EXPO 2010	ČTK	listopad
33	Literární noviny	T. Macek – Rostliny uklízejí po lidech	Literární noviny	listopad
34	ČR Radiožurnál	Z. Havlas – Financování vědy	ČR Radiožurnál	listopad
35	ČT Milénium	P. Jansa – Jak budou vypadat léky budoucnosti?	ČT Milénium	listopad
36	ČRo Leonardo	M. Hocek – Výzkum a modifikace DNA	ČRo Leonardo	listopad
37	<b>Dny otevřených dveří</b>	<b>V průběhu 3 dnů se akce zúčastnilo celkem 457 návštěvníků, z toho 390 studentů. Z ÚOCHB akcí zabezpečovalo 93 zaměstnanců z 28 vědeckých týmů.</b>		5.-7. listopad
38	iHned, Novinky CZ, rádio Česko, TV Nova, ČT1	P. Řezáčová – Bór, uhlík a kobalt v boji proti HIV/AIDS	iHned, Novinky CZ, rádio Česko, TV Nova,	prosinec
39	ČRo -rozhovor	J. Šobotník- Složitosti termitého života.	ČRo Leonardo	25.9.2009
40	ČRo -rozhovor	J. Šobotník- +Život v termišti	ČRo Leonardo	6.10.2009
41	Příprava natáčení ČT1	Cyklus o vědě – díl o ÚOCHB	ČT1	prosinec
42	Zvaná přednáška	Přednáška	Emory University, Atlanta, USA	15. dubna 2009, Atlanta, USA
43	Přednáška 3x	Prezentace výsledků-16. European Symposium on Organic chemistry ESOC 2009	ÚOCHB Praha	12- 16. červenec, Praha
44	Přednáška	Prezentace výsledků- Frontiers in Organic Synthesis Short Course" FROST2	American Chemical Society, Hungarian Chapter (ACS HC)	14-15. říjen, Budapest

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupředatel	6 Datum a místo konání
45	Přednáška 6x	Presentace výsledků- 44. konference Pokroky v organické, bioorganické a farmaceutické chemii	Česká společnost chemická	27.-29. listopad, Nymburk
46	Přednáška 2x	2 přednášky studentům z University of Applied Sciences, Antwerpen, Belgie na téma Food intake regulation - peptides as potential anti-obesity therapeutics	University of Applied Sciences, Antwerpen, Belgie	4.2. 2009, ÚOCHB
47	Otevřená věda pro středoškolské učitele	Přednáška	MŠMT	Nové Hrady – srpen 2009
48	Demonstrace	Demonstrace zařízení pro kapilární a průtokové elektromigrační metody studentům Mat. fyz. fak. UK, obor biofyzika, FPBT	ÚOCHB AVČR	Květen 2009, Laboratoř elektromigračních metod ÚOCHB AVČR

#### **IV. Hodnocení další a jiné činnosti:**

Předmět jiné činnosti ÚOCHB je podrobně specifikován v Oddíle II. Celkový rozsah jiné činnosti je 1,17% 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 období roku 2009 bylo na pracovišti provedeno několik kontrol.

1/ Audity 4 projektů 6. rámcového programu EU.

2/ Kontrola hospodaření provedená MŠ MT ČR, jejímž předmětem bylo čerpání a využití podpory na výzkum a vývoj, správné vykazování čerpání uznaných nákladů podle Smlouvy/Rozhodnutí včetně dokumentace k oponenturám, a to u devíti projektů výzkumu a vývoje.

3/ Kontrola provedená Všeobecnou zdravotní pojišťovnou, jejímž předmětem bylo zejména: správné stanovení vyměřovacích základů a výše pojistného, dodržování termínů splatnosti, dodržování oznamovací povinnosti atd.

Nedostatky nebyly zjištěny, nápravná opatření se neuložila.

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

Kromě dotací od zřizovatele a finančních prostředků od poskytovatelů grantů jsou hlavním zdrojem finančních příjmů ústavu licenční poplatky od firmy Gilead Sciences. Objem finančních zdrojů z licenčních příjmů má (v USD) stoupající tendenci a tato tendence se podle vyjádření zástupců firmy Gilead očekává i do budoucnosti. 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 láky 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 patentů formou akcií neobchodovatelných na veřejných trzích. Společnost se věnuje využití protivirotických látek ve veterinární

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

medicině. Pozitivní ekonomické výsledky se očekávají v horizontu dvou až tří let. Na základě podrobné analýzy komercializačních možností a předchozím schválení Radou pracoviště, Dozorčí radou a zřizovatelem byla v létě 2009 zaregistrována společnost IOCB TTO, s.r. o. (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry Technology Transfer Office). Náplní práce společnosti je zejména: vyhledávání vhodných projektů, pomoc při ochraně duševního vlastnictví, řízení postupu mezi národní a mezinárodní patentovou přihláškou, vyhledávání partnerů a investorů, licenční jednání, smlouvy s partnery a pod. Tato společnost je ze 100% vlastněna ústavem a kontrolována dozorčí radou ve složení Mgr. Tomáš Kraus, PhD., Ing. David Šaman, CSc. a paní Božena Petschová. Výkonným ředitelem společnosti byl jmenován doc. Ing. Martin Fusek, CSc. 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. První fáze rekonstrukcí, oprava budovy C, začne začátkem července 2010. Dostavba budovy B a rekonstrukce budovy A jsou ve stadiu územního rozhodování s předpokladem zahájení prací na přelomu 2010/2011.**

## VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:\*)

### §21 (2) a)

Po rozvahovém dni nenastaly žádné skutečnosti, které by byly významné pro naplnění účelu výroční zprávy.

### §21 (2) c)

Nově vytvořené (počátkem roku 2007) vědecké a vědecko-servisní týmy se řídí původním pracovním plánem schváleným na pětileté období, do termínu dalších evaluací v roce 2011. Předpokládaná činnost v tomto pětiletém období je tedy z velké 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 tyto využity jako potenciální sensory hybridizace DNA, obdobně označené oligonukleotidy budou využity k zakotvení na površích kovů 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** bude pokračovat 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. Dále

- 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 opičího viru. Budou identifikovány buněčné proteiny, které s touto doménou interagují a bude provedena strukturně funkční analýza matrixového proteinu opičího viru.

#### **V chemii steroidů**

- V oblasti neurosteroidů: budou připraveny nové typy neuroaktivních steroidů se zlepšenou metabolickou stabilitou a s dostatečnou rozpustností ve vodě,

- 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,

- v oblasti suprasteroidů 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,

- bude studována chemická komunikace u termitů a typy signálů, které se uplatňují mezi kastami v kolonii termitů,

- 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.

**V oblasti organické chemie** 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. Dále

- 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.

- 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 heterocyclickými 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 insulínu 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.

Ve spolupráci s vybraným komerčním subjektem bude zřízeno ÚOCHB Spin off pracoviště a v jeho kompetenci zahájena realizace vývoje nové skupiny imunoterapeutik na bázi modifikovaných muramylových glykopeptidů a jejich preklinické testování.

- Bude pokračovat design a syntéza 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.

- Bude pokračovat výzkum v oblasti synthesy cyklických oligosacharidů tvořených  $\beta(1\rightarrow4)$  vázanými 2-amino-2-deoxy-D-hexopyranosovými jednotkami.

**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 bází 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.

Budou nadále řešeny základní problémy 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 celoustravní servis v oboru CD, IR.

Bude pokračovat určování struktur a prostorového uspořádání biologicky významných přírodních a syntetických látek v roztocích pomocí vícerozměrných NMR technik na 600 MHz spektrometru vybaveném kryogenní sondou s vysokou citlivostí a s využitím molekulového modelování. Dále bude pokračovat

- vývoj nových metod pro určení absolutních konfigurací u biologicky významných látek pomocí *in situ* reakcí v NMR kvetách a teoretických výpočtů chemických posunů a interakčních konstant pomocí *ab initio* metod (modifikované peptidy a nukleotidy), zavádění měření NMR spekter v pevné fázi a samoobslužné 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.

**Společná laboratoř ÚOCHB a VŠCHT** se bude věnovat studiu regulačního efektu oxysteroidů na aktivitu zejména fotosyntetických enzymů RuBisCO, OEC (oxygen evolving complex), ATP synthasy a na aktivitu glutathion-S-transferasy (GST).

Zvýšená pozornost bude věnována ko-krystalizaci oxysteroidních ligandů s RuBisCO a X-ray difrakční analýze připravených krystalů, což umožní charakterizovat vazebné místo oxysteroidu a další výzkum založený na molekulárním modelování.

V rámci studia biologického odstraňování toxických látek ze životního prostředí budou identifikovány další produkty degradace PCB rostlinami, zejména ve srovnání s geneticky modifikovaným materiálem nesoucím degradační geny mikrobiálního původu. Jako modelová rostlina je použit tabák a len. Změny efektivity bioremediace

v rhizosférní oblasti rostlin vlivem selekce účinných mikrobiálních konsorcií budou sledovány v souvislosti s projektem „Metagenome studies in bioremediation“ jako změny v mikrobiální diversitě v závislosti na přítomnosti vybraných sekundárních metabolitů rostlin.

**Jsou zahajovány práce na dvou ERC Advance grantech.** Zahájení prací na těchto prestižních grantech vyžadovalo úpravu nových laboratorních prostor pro instalaci špičkových měřicích technik. Jeden grant je směřován do vývoje nových materiálů pro nanotechnologie, druhý k aplikačním možnostem MS technik.

§21 (2) e)

Ústav nemá organizační složku v zahraničí.

§21 (3)

Účetní jednotka nepoužívá investiční instrumenty ani obdobná aktiva a pasiva a není důvod používat zajišťovací deriváty.

## **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. 2009 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.

razítko

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

RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.

**Přílohou výroční zprávy jsou**

- a) číselná část**
  
- b) účetní závěrka a zpráva o jejím auditu**