

ÚOCHB AV ČR, v. v. i.

IČ: 61388963

Sídlo: Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2011

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 12. června 2012

Radou pracoviště schválena dne: 14. června 2012

V Praze dne 15. června 2012

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., Ph.D., ÚOCHB AV ČR, v. v. i.**

členové:

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

Moravcová Jitka, Prof., Ing., CSc., VŠCHT Praha

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

Hodačová Jana, Ing., Ph.D., VŠCHT Praha

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

Konvalinka Jan, Doc., RNDr., 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., RNDr., DrSc., Vědecká rada AV ČR

Drahoš Jiří, Prof., Ing., 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.

Mgr. Tomáš Chalupa ukončil členství v souvislosti s jmenováním do funkce ministra Vlády ČR od 17. 1. 2011.

c) Informace o činnosti orgánů:

Ředitel:

V průběhu roku 2010 bylo vydáno 24 příkazů ředitele a 14 informací vedení. Kromě příkazů s charakterem operativních nařízení byly příkazy ředitele ustanoveny nové týmy na podporu a realizaci projektů komercializace duševního vlastnictví. Byl zřízen servisní tým Neuroprotektiva a vědecko-servisní tým Medicinální chemie. Dále, po dohodě s radou pracoviště, byl zřízen tým Bioinformatika s účelem účasti na projektu ELIXIR. 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. Vzrůst počtu publikací byl však mírný.

Po diskusi s radou pracoviště a International Advisory Board byly připraveny evaluace vědeckých týmů ústavu, které proběhnou v roce 2012. Uskutečnila se evaluace ústavu a jeho týmů v rámci hodnocení AV ČR.

Významným úkolem je příprava kompletní rekonstrukce a dostavby areálu. Bylo vyhlášeno výběrové řízení na zhotovitele akce. Dokončení výběrového řízení a zahájení prací je plánováno na rok 2012. Byly dokončeny plány rekonstrukce haly B, ve které budou umístěny laboratoře poloprovozu a dále bude sloužit pro přenos technologií a pro přípravu látek ve větším měřítku. Realizace této akce je však podmíněna získáním řady povolení, která se v některých případech nepodařilo získat vzhledem k dlouhým termínům vydávání povolení na některých úřadech (hlavně Magistrátu Hl. města Praha). Byla ukončena rekonstrukce budovy C (biochemie) v areálu ústavu a prostory byly dány do užívání. Byly upraveny některé místnosti a laboratoře v budově A pro dočasné použití v době hlavní rekonstrukce.

Ústav se aktivně zúčastnil akcí Roku chemie, vyhlášené UNESCO a zorganizoval

řadu propagačních akcí (divadelní hra Oxygen, Dny chemie, přednášky).

Pokračovala činnost Výzkumného centra Gilead Sciences, podporovaného touto firmou zvláštní dotací. Vzhledem k ukončení prvního pětiletého období v roce 2011 byla dohodnuta podpora na dalších pět let.

V rámci Invited Lecture Series se uskutečnilo na ústavu 11 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 USA.

Úspěšně se rozvíjí činnost dceřiné 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.

Ústav úspěšně ukončil transformaci vědeckého časopisu Collection of the Czechoslovak Chemical Communication na časopis ChemPlusChem vydavatelství Wiley. Důvodem transformace byly dlouhodobé potíže se získáváním kvalitních rukopisů a stagnující úroveň časopisu. Převodem pod vydavatelství Wiley se zvýšila naděje na oživení časopisu.

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

Rada pracoviště:

V roce 2011 se uskutečnilo 9 jednání Rady ÚOCHB AV ČR, v.v.i.(všichni členové Rady, kteří se nezúčastnili jednotlivých zasedání, byli řádně omluveni. Účast členů (uvádění dle prezenční listiny v abecedním pořadí, bez titulů) a nejdůležitější projednávané body podává následující přehled:

1. zasedání – 20. 1. 2011

Přítomni: M. Buděšínský, J. Hodačová, J. Konvalinka, T. Kraus, L. Rulíšek, H. Sychrová

Hosté: Z. Havlas

RP doporučuje předložit analýzu současného stavu i předběžný návrh koncepce k připomínkám pracovníků ústavu a v prvním kroku požádala doc. Konvalinku o stručnou prezentaci současného stavu vývoje koncepce na shromáždění pracovníků ústavu dne 21. ledna 2011.

Dr. Havlas informoval RP o návrzích na nákup velkých přístrojů v roce 2011. Po diskusi RP doporučila vedení oslovit Metodickou radu ÚOCHB s žádostí o vyjádření k jednotlivým návrhům. Vyjádření Metodické rady je třeba dodat RP v písemné formě týden před dalším zasedáním dne 17. února 2011.

Dr. Havlas seznámil RP s průběhem evaluací ústavů AV ČR, které na ÚOCHB proběhly dne 14. ledna. Ke způsobu hodnocení ústavu a průběhu evaluací proběhla široká kritická diskuse. RP děkuje všem, kteří se evaluací zúčastnili a vyzývá

předsedu, doc. Konvalinku, aby společně s ředitelem ústavu dr. Havlasem formulovali připomínky ke způsobu hodnocení.

RP se ztotožňuje s názorem vedení na etapizaci interních evaluací vědeckých týmů:

1. Na podzim roku 2011 proběhne příprava materiálů (připraví vedoucí týmů, detaily budou vedením ústavu upřesněny), 2. evaluace (prezentace vedoucích) za účasti evaluační komise se uskuteční během tří dnů do poloviny roku 2012.

Dr. Havlas informoval o přípravách oslav výročí prof. Holého ve dnech 4. 5. května 2011.

2. zasedání – 17. 2. 2011

Přítomni: M. Buděšínský, J. Konvalinka, T. Kraus, J. Moravcová, L. Rulíšek, H. Sychrová, I. Valterová

Hosté: Metodická rada: M. Hocek, J. Cvačka

Ve shodě s návrhem metodické rady RP doporučuje zakoupit a plně hradit z prostředků ústavu přístroje z kategorií 1) velmi potřebné a 2) potřebné, tj.

Kategorie 1): Kryogenní NMR mikrosonda (4,7 M Kč), MALDI TOF/TOF (12-14 M Kč), HR ESI MS/MS (14-16 M Kč).

Kategorie 2): IR spektrometr (3.6 M Kč) a HPLC (1.7 M Kč).

Pokud jde o kategorii 3): Glovebox (0.5 M Kč) a tritiaci (1.2 M Kč), RP navrhuje vedení, aby pro přístroje, které nejsou zcela servisní, platila obecná zásada 50% ko-financování z prostředků týmu.

Rada schvaluje výběr významných zahraničních vědců (14) a dvou mladších „rising stars“ pro zvané přednášky. Osloveni budou (příjmení bez titulů): Fréchet, Meldal, Bäuerle, Simons, Aizenberg, Toste, Kiessling, Schepartz, Giese, Haass, Freeman, Curran, Crabtree, Schrock + White a Chin.

Rada aklamací jednomyslně schvaluje konečné znění dopisu předsedovi AV ČR prof. J. Drahošovi. Ke znění dopisu, který shrnuje kritické připomínky ústavu k průběhu návštěvy hodnotící komise na ústavu, se členové RP vyjadřovali v minulých dnech elektronickou poštou.

3. zasedání – 24. 3. 2011

Přítomni: M. Buděšínský, J. Konvalinka, T. Kraus, J. Moravcová, L. Rulíšek, H. Sychrová, I. Valterová

Hosté: Z. Havlas., D. Schröder, P. Hobza

Metodická rada: P. Jungwirth, M. Hocek, J. Cvačka, M. Mareš

Dr. Havlas informoval RP o předběžných výsledcích jednání v záležitosti obměny složení Advisory Board (AB) ÚOCHB. Obměna předpokládá výměnu přibližně 6 členů současného AB. Jako noví členové jsou navrženi: Prof. K.H. Altman (ETH Zürich), dr. M.D. Mihovilovic (Vienna University of Technology), prof. B.V.L. Potter (University of Bath) a prof. W. Thiel (MPI für Kohlenforschung, Mülheim), s dalšími dvěma kandidáty jednání ještě probíhají. Rada bere informaci ředitele bez připomínek na vědomí.

Rada aklamací jednomyslně schvaluje teze koncepce ústavu na léta 2011 - 2020.

4. zasedání – 12. 5. 2011

Přítomni: M. Buděšínský, J. Konvalinka, T. Kraus, L. Rulíšek, H. Sychrová, I. Valterová

Hosté: Z. Havlas, I. Pichová, B. Petschová, P. Řezáčová, L. Bednářová, S. Matějková

Metodická rada: P. Jungwirth, M. Hocek, J. Cvačka, M. Mareš

Rada zváží možnost zrušení některých celoustavně málo využívaných servisů, kromě toho doporučuje zavést zkušebně roční účtování tzv. „na slepo“ s tím, že žádá THS a vedení ústavu o návrh takového technického řešení způsobu evidence, který by co nejméně administrativně zatěžoval vědecké pracovníky ústavu.

Rada aklamací doporučuje (4 hlasy pro, 2 členové se zdrželi) vedení zavedení věkového limitu 65 let pro vedoucí týmů. V případě „Distinguish Chair“ ponechání možnosti vedení týmu velikosti juniorské skupiny. Detaily mechanismu včetně ukončení evaluačního procesu budou upřesněny v materiálu koncepce (mechanismy).

Doc. Konvalinka řídil diskusi o podnětech a návrzích mladších spolupracovníků k praktickým aspektům běžného chodu ústavu. Rada doporučuje vedení v oblasti

1) bezpečnosti práce – doplnit do seznamu číslo mobilu bezpečnostního technika s definicí oprávnění (současně připomíná, že za bezpečnostní školení je ze zákona zodpovědný vedoucí týmu), záležitost pravidelných lékařských prohlídek projednat s ústavní lékařkou, 2) IT skupiny - specifikovat pracovní náplň IT, vyzkoušet možnost zavedení mailové adresy „all“ umožňující přímou komunikaci všech pracovníků ústavu, a podle přání vedoucích i skupinové mailové adresy pro pracovníky jednotlivých skupin, 3) dostupnosti informací – organizovat setkání zahraničních pracovníků ÚOCHB, 4) plně elektronický způsob objednávání a současně přehled o pohybu a likvidaci chemikálií na ústavu s možností prohledávání. Vedení ústavu prověří technické a legislativní podmínky pro takové řešení a bude Radu informovat.

Rada projednala a po drobných formálních připomínkách aklamací jednomyslně schválila vědeckou část Výroční zprávy za rok 2010. Ekonomická část zprávy, vč. Auditu bude projednána separátně na příštím zasedání RP.

5. zasedání – 2. 6. 2011

Přítomni: M. Buděšínský, J. Hodačová, J. Konvalinka, T. Kraus, J. Moravcová, L. Rulíšek, I. Valterová

Hosté: Z. Havlas, B. Petschová

Rada aklamací jednomyslně schvaluje:

- a) úpravy rozpočtů k 31. 12. 2010,
- b) výsledek hospodaření po zdanění za rok 2010 ve výši 720 805 002,28 Kč,
- c) rozdělení výsledku hospodaření po zdanění za rok 2010 do fondů 1) v souladu s §24 odst. 1 písmeno a) zákona o VVI přiděl ve výši Kč 36 041 000,00 Kč do Rezervního fondu, 2) v souladu s §25 odstavec 1 písmeno b) přiděl ve výši Kč 684 764 002,28 Kč do fondu reprodukce majetku,
- d) výroční zprávu o činnosti a hospodaření ÚOCHB za rok 2010, vč. účetní závěrky a zprávy o jejím auditu.

Rada aklamací jednomyslně schvaluje teze dokumentu Vědecká koncepce ÚOCHB AV ČR a mechanismy jeho fungování v letech 2011 – 2020 a pověřuje předsedu, doc. Konvalinku, aby teze prezentoval na společném zasedání RP, vedení a Dozorčí

rady ÚOCHB dne 10. 6. 2011 v Loučeni.

6. zasedání – 8. 9. 2011

Přítomni: M. Buděšínský, J. Hodačová, , J. Konvalinka, T. Kraus, J. Moravcová, L. Rulíšek, I. Valterová

Hosté: Z. Havlas

Funkční období této Rady ÚOCHB končí dnem 31. 12. 2011. Do tohoto dne musí být známo složení nové Rady. Předběžný plán aktivit Rady pro zbylé období mimo jiné zahrnuje následující kroky: Schůzi VŠ pracovníků, aktualizovaný volební řád a volby nové Rady pracoviště.

Ředitel ÚOCHB Z. Havlas informoval členy Rady o evaluacích činnosti vědeckých týmů v období 2007 - 2011. Plán průběhu evaluací, který byl projednán s International Advisory Board je následující: a) Zpráva o činnosti skupiny a vědeckých výstupech sepsaná podle jednotného vzoru vedoucími skupin, b) Peer-review odevzdaných materiálů, c) on-site visit členů IAB a ústní presentace hodnocených a d) vyhlášení konkursu na uvolněné pozice.

7. zasedání – 12. 10. 2011

Přítomni: M. Buděšínský, J. Hodačová, J. Konvalinka, T. Kraus, L. Rulíšek, H. Sychrová, I. Valterová

Hosté: Z. Havlas

Metodická rada: P. Jungwirth, M. Hocek, M. Mareš

Rada aklamací schvaluje (7 hlasů pro, 0 proti, nikdo se nezdržel) dokument Koncepce ÚOCHB. Po dopracování anglické alternativy dokumentu, budou obě jazykové verze umístěny na webových stránkách ústavu.

Rada schvaluje zachování formy voleb „do košů“ s tím, že počet volebních košů bude redukován na tři interní a jeden externí (4hlasů pro, 1 proti, 1 člen se zdržel hlasování). Volební řád vč. seznamu oprávněných voličů bude zveřejněn v nejbližší době. Shromáždění voličů s navazujícím 1. kolem voleb se uskuteční 5. prosince.

8. zasedání – 2. 11. 2011

Přítomni: J. Hodačová, J. Konvalinka, T. Kraus, J. Moravcová, L. Rulíšek, H. Sychrová, I. Valterová

Hosté: Z. Havlas, J. Vondrášek

Rada doporučuje vedení: a) personálně posílit pozici bezpečnostního technika angažováním chemika, který by pomáhal průběžně (i preventivně) řešit případné nedostatky v laboratořích či nastalé problémy a byl dosažitelný telefonem i e-mailem, b) zajistit umístění informačních tabulek s velmi stručným praktickým návodem v češtině i angličtině, co dělat v případě požáru nebo jiné mimořádné události v každé laboratoři, c) ve spolupráci s bezpečnostním technikem a Metodickou radou identifikovat hlavní bezpečnostní rizika v jednotlivých oborech na ÚOCHB a vypracovat stručnou, aktuální a prakticky orientovanou metodickou příručku pravidel bezpečné práce a d) rozšířit náplň bezpečnostního školení o řešení praktických problémů týkajících se každodenního chodu laboratoří.

Rada aklamací schvaluje (7 hlasů pro, 0 proti, nikdo se nezdržel) navýšení rezervy rozpočtu investic o 30 mil. Kč v souvislosti s pořízením přístrojového vybavení do budovy C. Částka nemusí být v roce 2011 vyčerpána a v tom případě bude

převedena do příštích let.

Rada aklamací schvaluje (6 hlasů pro, 0 proti, 1 se zdržel) úpravu rozpočtu na rok 2011 navýšením investic o 20 mil. Kč v souvislosti se záměrem přispět v souladu s § 121 odstavec 2 Obchodního zákoníku na vytvoření vlastního kapitálu společnosti IOCB TTO s.r.o. mimo základní kapitál formou dobrovolného příplatku společníka. Úprava se provede po získání předchozího souhlasu DR a zřizovatele.

Rada aklamací jednomyslně schvaluje navýšení rozpočtu investic o 900 mil. Kč za účelem nákupu cenných papírů (státní dluhopisy ČR a pokladniční poukázky).

Dr. Vondrášek informoval detailně o možnosti přispět zapojením ČR k rozšíření infrastruktury evropského projektu ELIXIR (bioinformatika) formou vytvoření národního uzlu. Tento národní uzel by vytvářel a spravoval databázi biologických dat malých biomedicinních molekul. Garantem infrastruktury na národní úrovni je MŠMT, které prostřednictvím CESNETu bude financovat hardware, na ÚOCHB by se mohlo jednat o vytvoření nové skupiny bioinformatiky. Rada souhlasí s podáním projektu a za předpokladu, že bude rozhodnuto o udělení, doporučuje vznik standardního vědecko-servisní týmu.

9. zasedání – 1. 12. 2011

Přítomni: M. Buděšínský, J. Hodačová, J. Konvalinka, T. Kraus, J. Moravcová, L. Rulíšek, I. Valterová

Hosté: Z. Havlas, I. Pichová, B. Petschová

Rada připomíná, že úřední hodiny bezpečnostního technika jsou již dlouhodobě ÚT: 8 - 12 hod., ST:11 – 15 hod. Pro zlepšení komunikace doporučuje vedení a) zřídit ústavní e-mail bezpečnostního technika a odkaz na číslo jeho mobilního telefonu umístit na tabulku v každé laboratoři, b) organizovat pravidelná diskusní setkání bezpečnostního technika s pracovníky ústavu. Dále Rada doporučuje vedení zavést funkci poradce ředitele pro otázky bezpečnosti práce a obsadit ji velmi zkušeným a respektovaným chemikem z řad pracovníků ústavu.

Doc. Konvalinka seznámil RP s iniciativou studentů ÚOCHB pořádat neformální studentská setkání, kde budou studenti prezentovat své skupiny a používané metody, s cílem přispět k celkovému přehledu o přístrojovém vybavení a metodické kvalifikaci jednotlivých skupin i navázání užších vzájemných kontaktů mezi studenty různých vědeckých týmů. Rada i přítomní zástupci vedení velice vítají tuto studentskou iniciativu a souhlasí s podporou ústavu při organizačním zajišťování akcí, zejména pokud jde o zajištění posluchárny a finančního příspěvku na občerstvení.

Rada aklamací jednomyslně schválila převod finančních prostředků ve výši Kč 900 mil. z Rezervního fondu do Fondu reprodukce majetku.

Rada připomíná, že volby do Rady ÚOCHB (1. kolo) se konají dne 5. 12. 2011 v přednáškovém sále ústavu bezprostředně po shromáždění výzkumných pracovníků v 10:00 hod.

Záписы ze zasedání Rady ÚOCHB jsou přístupné na

<http://www.uochb.cas.cz/Zpravy/Rada/>

Dozorčí rada:

V roce 2011 se Dozorčí rada sešla celkem na 3 zasedáních. Účast členů (uvádění dle prezenční listiny v abecedním pořadí, bez titulů) a nejdůležitější projednávané body podává následující rekapitulace:

Zasedání 4. února 2011

Přítomni: Illnerová H., Rákosník J., Šaman D. Šebo P.

Omluveni: Šebek P.

Hosté: Petschová B. (zástupkyně ředitele pro věci ekonomické), Létal R., MBA (ředitel A&CE Global Finance, a. s.)

Nejdůležitější projednávané body:

- Předseda DR informoval o ukončení členství Mgr. T. Chalupy v DR ÚOCHB v souvislosti s jeho jmenováním do funkce ministra dne 17. 1. 2011.
- DR ověřila výsledek hlasování per rollam, kterým udělila předchozí souhlas
 - a) k zakoupení přístrojů v rámci projektu Centrum molekulárních interakcí v biomedicině,
 - b) k pronájmu prostorů pro účely dočasného přestěhování dvou týmů po dobu rekonstrukce areálu od firmy REMU s.r.o.
- DR vyslechla informace paní Petschové a zástupce akciové společnosti A&CE Global Finance, která je zakládajícím členem České asociace obchodníků s cennými papíry, a seznámila se se základními charakteristikami státních pokladničních poukázek a dluhopisů a s právními a ekonomickými aspekty investování do cenných papírů. DR souhlasí se záměrem ÚOCHB bezpečně uložit volné finanční prostředky do nákupu státních dluhopisů a žádá, aby jí ústav předložil zadávací dokumentaci pro výběr vhodných správců portfolia a průběžně ji informoval o postupu.

Zasedání 11. června 2011 - společné zasedání Dozorčí rady a Rady pracoviště v Loučeni

Přítomni: Illnerová H., Rákosník J., Šaman D., Šebek P., Šebo P.

Omluveni: -

Hosté: Havlas Z. (ředitel ÚOCHB AV ČR, v.v.i.), Petschová B. (zástupkyně ředitele pro věci ekonomické), Fusek M. (ředitel společnosti IOCB TTO, s. r. o.)

Nejdůležitější projednávané body:

- DR ověřila výsledek hlasování per rollam z období 26. 4 – 6. 5., kterým udělila předchozí souhlas
 - a) s pořízením přístrojů: Q-TOF v kombinaci s HPLC v ceně 16 mil. Kč, MALDI TOF/TOF v ceně 11 mil. Kč a 400 MHz NMR spektrometr vybavený kryogenními mikrosondami v ceně cca 18 mil. Kč,
 - b) s uzavřením budoucí smlouvy o zřízení věcného břemene k tíži pozemku parc. č. 641/1 na parcele 4270 KÚ Dejvice v souvislosti s vybudováním kanalizační přípojky ke garážím ÚOCHB v ceně 15 500 Kč,
 - c) s nabytím nemovitého majetku ve formě jednoho bytu v lokalitě Prahy 6 v ceně 3,0 – 3,9 mil. Kč.
- DR se seznámila s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření ÚOCHB AV ČR, v.v.i., za rok 2010 a po projednání drobných připomínek ji se souhlasem přijala.

- DR hodnotí manažerské schopnosti ředitele ve vztahu k pracovišti jednomyslně jako vynikající.
- DR bere se souhlasem na vědomí závěrečnou úpravu rozpočtu, skutečnosti nákladů a výnosů a rozdělení HV ÚOCHB za rok 2011.
- DR bere se souhlasem na vědomí návrh rozpočtu na rok 2011.
- DR žádá vedení ÚOCHB o průběžné informování ve věci úprav zadávací dokumentace pro výběrové řízení na nákup cenných papírů.

Zasedání 29. listopadu 2011

Přítomni: Illnerová H., Rákosník J., Šaman D., Šebek P., Šebo P.

Omluveni: -

Hosté: Havlas Z. (ředitel ÚOCHB AV ČR, v. v. i.), Petschová B. (zástupkyně ředitele pro věci ekonomické), Špička J. (zástupce ředitele pro výstavbu), Fusek M. (ředitel společnosti IOCB TTO, s. r. o.)

Nejdůležitější projednávané body:

- DR ověřila výsledek hlasování per rollam z období 12. 6. – 28. 11. 2011, kterým DR udělila předchozí souhlas
 - a) s nabytím bytové jednotky velikosti 2+1 v ceně cca 2 750 000 Kč,
 - b) s uzavřením Smlouvy o smlouvě budoucí mezi ÚOCHB a PRE distribuce, a.s.,
 - c) s uzavřením recipročních smluv o pronájmu laboratorních prostor mezi ÚOCHB a UK v Praze
- DR se seznámila s oceněním rekonstrukce a dostavby centrální části areálu ÚOCHB a vývojem ústavních financí.
- DR bere se souhlasem na vědomí úpravu významných investičních položek rozpočtu ÚOCHB.
- DR uděluje aklamací jednomyslně předchozí souhlas k ekonomickému posílení dceřiné společnosti IOCB TTO, s.r.o., formou dobrovolného příplatku společníka ve výši 20 mil. Kč na vytvoření vlastního kapitálu mimo základní kapitál společnosti. Toto vložení majetku do jiné právnické osoby je v souladu s §19 odst. 1 písmeno b) bod 6. zákona o VVI a v souladu s §121 Obchodního zákoníku.
- DR uděluje aklamací jednomyslně předchozí souhlas s uzavřením
 - a) podnájemní smlouvy na dvě parkovací stání v garáži NTK,
 - b) smlouvy o pronájmu bytu v majetku ÚOCHB bývalému zaměstnanci Jaroslavu Němcovi.
- DR uděluje aklamací jednomyslně předchozí souhlas s prodloužením nájemní smlouvy mezi ÚMG AV ČR, v.v.i., jako pronajímatelem a ÚOCHB AV ČR, v.v.i., jako nájemcem k nebytovým prostorám o výměře 83,53 m² za stejných podmínek jako dosud.
- DR uděluje aklamací jednomyslně předchozí souhlas s navýšením nákupní ceny NMR spektrometru a příslušenství.

Všechny zápisy ze zasedání Dozorčí rady ÚOCHB jsou přístupné na http://www.uochb.cas.cz/Zpravy/Dozorci_rada/

II. Informace o změnách zřizovací listiny:

Během roku 2011 nedošlo ke změnám zřizovací listiny

III. Hodnocení hlavní činnosti:

a) Vědecká činnost pracoviště a uplatnění jejích výsledků

Česky: Hlavním posláním ÚOCHB je základní, badatelský výzkum chemických a biologických dějů na molekulové úrovni. V souladu s tímto posláním byl výzkum v roce 2011 orientován do šesti základních oblastí:

Bioorganická a medicínální chemie, kde

- pokračoval intenzivní výzkum v oblasti modifikovaných nukleobází, nukleosidů, nukleotidů a nukleových kyselin pro aplikace ve farmakochemii, bioanalýze a chemické biologii a dále vývoj deazapurinových nukleosidů jako nových nanomolárních cytostatik. Dvě nejaktivnější látky úspěšně pokračují v preklinických in vivo testech na UP Olomouc a je studován mechanismus účinku;
- byla vyvinuta efektivní metodika konstrukce funkcionalizovaných oligonukleotidů a DNA pomocí cross-coupling reakcí nukleosid trifosfátů ve vodném prostředí;
- byla vyvinuta nová metodika syntézy konjugátů DNA a peptidů pomocí reduktivní aminace aldehydem-modifikovaných DNA s lysinem;
- pokračoval i vývoj metodiky modulární syntézy C-nukleosidů, pomocí které byly připraveny velké série 6-substituovaných pyridin-3-yl a 5-substituovaných pyridin-2-yl ribonukleosidů;
- zvláštní pozornost byla věnována zlepšování biologických aktivit a farmako-kinetického profilu acyklických nukleosidfosfonátů jejich transformací na vhodná profarmaka; syntézy analogů modifikovaných v bazické části byly zaměřeny zejména na sloučeniny s aza- nebo deazapurinovouází, 5-azacytosinové deriváty a pyrimidin-2-onové nukleosidy;
- pokračoval design a vývoji purinových ANP jako inhibitorů enzymu hypoxanthin-guanin-(xanthin) fosforybosltransferázy (HG(X)PRTázy), klíčového enzymu původců malárie Plasmodium falciparum a Plasmodium vivax;
- byla vyvinuta nová metodika syntézy norbornanových derivátů a látek obsahujících norbornany s anelovanými heterocykly a azanorbornanovým skeletem;
- byl studován metabolismus analogů složek nukleových kyselin ve vztahu k mechanismu jejich protinádorových, protivirových a dalších farmakologicky významných účinků;
- byla rozvíjena chemie a biologické aplikace nových 5'-epimerních 3'-deoxy-3',4'-didehydronukleosid-5'-C-fosfonátů a jejich 3-hexadecyloxypropyl esterů jako depotní formy pro biologické aplikace a nových konformačně zajímavých analogů nukleotidů s furanosyl a tetrofuranosylfosfonátovým seskupením, mezi kterými byly nalezeny inhibitory lidské thymidinfosforylasy ;
- v oblasti modifikovaných oligonukleotidů byly studovány nové aktivátory RNasy L na bázi tetramerních oligoadenylátů s 2'- a 5'-fosfonátovými nukleotidovými jednotkami a s 5'-koncovým fosfonátem jehož absolutní stabilita vůči defosforylaci je zcela zásadní pro biologické aplikace.

Biochemie a molekulární biologie, kde

- byla provedena strukturně funkční analýza klíčových proteinů retrovirů a patogenních kvasinek se zaměřením na vývoj nových typů léků proti nemocem způsobeným těmito

patogeny. Výzkum je zaměřený na interakci patogenů s hostitelskými buňkami a určení strukturních motivů proteinů patogenů důležitých pro interakci.;

- byla vyřešena pomocí rentgenové krystalografie první prostorová struktura katepsinu B1 (SmCB1) a to ve formě komplexů s peptidomimetickými inhibitory. Získané výsledky otevírají cestu pro racionální vývoj inhibičních molekul jako potenciálních nových léčiv proti schistosomóze;

- byly objeveny lipofilní substráty a inhibitory GCPII, které jsou schopné přecházet přes mozkomíšní bariéru a nové nízkomolekulární inhibitory serinracemasy z lidského mozku;

- byly objeveny nové analogy peptidu uvolňujícího prolaktin v hypofýze a nové analogy lidského insulinu s potlačenou dimerizační schopností;

- bylo vyřešeno struktura peptidového antagonisty, který výrazně zlepšuje obezitu a související metabolické abnormality the prolactin;

- byla prováděna cílená syntéza steroidních sloučenin s neuroprotektivní aktivitou a steroidních i nesteroidních regulátorů růstu rostlin.

Organická syntéza, kde

- byla dále rozvíjena metodika syntézy a výzkum reaktivity organických fluorovaných molekul a metodika syntézy N-heteroaromatických kationtů;

- byl využit syntetický potenciál organosirných sloučenin pro transformace organických substrátů katalyzované tranzitními kovy;

- bylo zjištěno, že k navázání alkylových řetězců na zlato mohou být použity organokovové sloučeniny cínu, rtuti a germania;

- byly připraveny alloxazin-cyklodextrinové konjugáty a studovány jejich katalytické schopnosti;

- byla věnována pozornost syntéze pi-elektronových systémů, jejich využití v enantioselektivní katalýze a studiu jejich samoskladby na pevných površích.

Chemie přírodních látek, kde

- nové antimikrobiální peptidy (AMP) byly izolovány z přírodních zdrojů, a to převážně z jedu hmyzu řádu Hymenoptera (vosy, včely a čmeláci). Další studovanou skupinou AMP byly defensiny izolované z imunitního systému hmyzu, či defensiny izolované z otevřených infikovaných ran dolních končetin diabetických pacientů;

- byly studovány různé aspekty chemické komunikace hmyzu. Poznatky jsou využívány pro chemotaxonomii, fyziologii, biochemii, integrovanou ochranu proti škodlivým druhům, integrovanou ochranu užitečných druhů;

- byla rozvíjena metodika totální syntézy přírodních látek (lipidy) a studována biologická aktivita těchto látek.

Výpočetní chemie, spektroskopie a fyzikální organická chemie, kde

- pokračovalo teoretické studium struktury, energetiky, vlastností a reaktivity biomolekul a biomolekulových komplexů včetně protein-ligand komplexů v plynné, mikrohydratované a hydratované fázi. Statické a dynamické vlastnosti jsou určeny jak pomocí molekulové mechaniky tak i přesných kvantově-chemických korelovaných ab initio výpočtů a metod molekulové dynamiky;

- pokračovalo studium interakcí kovových iontů s bimolekulárními ligandy;

- byly popsány denaturační mechanismy modelových proteinů pomocí simulací a experimentů;

- pokračovalo studium inverzního vlivu těžkého atomu na velikost spin-orbitální vazby v substituovaných biradikálech, karbonylových sloučeninách a pyridinech, studium vlivu

porušení parity na štěpení složek nejnižšího tripletu chirálních biradikálů, studium chromoforů vhodných pro singlet fission, studium substituovaných karboranových anionů s vysokou ionizační energií a vývoj programového vybavení ke kvazirelativistickým kvantově chemickým výpočtům;

- pokračoval vývoj nových spektroskopických metod. Podařilo se změřit Ramanovu optické aktivitu oxiranu v plynné fázi, což má základní význam pro stanovení výpočetních standardů a další rozvoj této metody. Ve spolupráci s univerzitou v Calgary byla také aplikována spektroskopie vibračního cirkulárního dichroismu k detekci kvadruplexových forem DNA;

- výzkumná činnost byla zaměřena na řešení struktur, stereochemie, konformační analýsy, studium dynamických procesů a predikci NMR a MS parametrů pomocí moderních experimentů a výpočetních metod;

- pokračovaly snahy o propojení mezi aplikovanou a teoretickou chemií. Hlavními okruhy výzkumu jsou: (i) struktura a přeuspořádání nových organických a anorganických sloučenin jednou a několikánásobně nabitých iontů, (ii) studie solvatace iontů v plynné fázi, (iii) chemie redox aktivních sloučenin, (iv) kovem zprostředkovanou aktivaci vazeb a jako poslední neméně důležitá (v) katalýza oxidačních reakcí.

Společná laboratoř ÚOCHB a VŠCHT, kde

- byla výzkumná aktivita soustředěna zejména na identifikaci a charakterizaci oxysterolových efektorů rostlinných enzymů a zvýšení účinnosti rhizosferní remediace kontaminované půdy.

Náplní činnosti **Laboratoře radioisotopů** bylo poskytovat výzkumným skupinám ústavu značené sloučeniny, které jsou komerčně nedostupné.

Anglicky: Following the long-term research mission which focuses on the investigation and understanding of chemical and biological phenomena in molecular detail, the main research activities of IOCB in 2011 evolved around six themes:

Bioorganic and medicinal chemistry, where

- extensive research continued in the area of modified nucleobases, nucleosides, nucleotides and nucleic acids for applications in medicinal chemistry, bioanalysis and chemical biology, two deazapurine nucleoside analogs continue in the preclinical in vivo tests at UP Olomouc as nanomolar cytostatics;

- efficient methodology has been developed for the construction of functionalized oligonucleotides and nucleic acids based on cross-coupling reactions of nucleoside triphosphates in aqueous solutions;

- a novel methodology for the synthesis of DNA conjugates with peptides was developed based on reductive aminations of aldehyde-modified DNA with lysine;

- development of modular methodology of synthesis of C-nucleosides continued by preparation of large series of 6-substituted pyridin-3-yl and 5-substituted pyridin-2-yl ribonucleosides;

- special attention was paid to improvement of biological activity and pharma-cokinetic profile of ANPs by their transformation to appropriate prodrugs; syntheses of base-modified analogues were focused on compounds bearing an aza/deaza purine moiety (antitumor compounds, thymidine phosphorylase inhibitors), 5-azacytosine compounds (antivirals, cytostatics) and pyrimidin-2-one nucleosides (antitumor compounds, anti HCV agents);

- research continued in the area of design and synthesis of antimalarial purine ANPs as

inhibitors of hypoxanthine-guanine-(xanthine) phosphorybosyltransferase (HG(X)PRTase), a key enzyme of the malarial parasites *Plasmodium falciparum* and *Plasmodium vivax*.

- development of new methodologies for the synthesis of norbornane derivatives containing norbornane bicycle annulated with heterocyclic rings and azanorbornane derivatives;
- research continued on metabolism of the analogs of nucleic acid components and its relation to the mechanism of their anticancer, antiviral and other pharmacologically relevant effects;
- we developed chemistry of new 5'-epimeric 3'-deoxy-3',4'-didehydronucleoside-5'-C-phosphonates and their 3-hexadecyloxypropyl esters as prodrugs for in vivo application and new, conformationally interesting analogs of nucleotides with furanosyl a tetrahydrofuranosylphosphonate moiety among which we found potent inhibitors of human thymidine phosphorylase;
- we studied new agonists of RNase L based on tetrameric oligoadenylates with 2'- a 5'-phosphonate nucleotide units and the 5'-end phosphonate group, the absolute stability of which against dephosphorylation is ultimate requirements for biological applications.

Biochemistry and molecular biology, where

- structure-function analysis of key proteins of retroviruses and pathogenic yeasts was carried out focusing on development of new types of drugs against diseases caused by these pathogens. Investigation of interaction of pathogens with the host cells and identification of structure motifs critical for this interaction;
- the first crystallographic structure of SmCB1 and its complexes with pep-tidomimetic inhibitors have been reported. Our results provide a footing for the rational design of inhibitory compounds for the development of novel anti-schistosomal drugs;
- inhibition of human serine racemase and glutamate carboxypeptidase II was intensively studied as an emerging target for medicinal chemistry;
- the prolactin-releasing peptide has been characterized, its analogs prepared and their biological properties investigated;
- the peptidic GHS-R antagonist [D-Lys3]GHRP-6 has been found to markedly improve adiposity and related metabolic abnormalities;
- targeted synthesis of steroid/non-steroid compounds with the neuroprotective and/or plant growth regulatory activities.

Organic synthesis, where

- continued the development of new synthetic methodologies for organic fluorinated molecules and N-heteroaromatic cations focusing on properties of these compounds with respect to applications;
- synthetic potential of organosulfur compound has been utilized in metal catalyzed transformations of organic substrates;
- It was found that organometallic compound of tin, mercury, and germania can be used to attach alkyl chains to gold directly;
- the alloxazin-cyclodextrin conjugates have been prepared and their catalytic properties studied;
- the attention has been paid to the synthesis of pi-electron systems, their application to enantioselective catalysis and their self-assembly on solid surfaces.

Chemistry of natural products, where

- novel antimicrobial peptides (AMPs) were isolated from natural sources, particularly

from the venom of the insect of Hymenoptera order (wasps, bees, bumblebees). We also study insect defensins – the group of AMPs isolated from the immune system of insect or defensins isolated from the open infected wounds of the feet of diabetic patients;

- various aspects of insect chemical communication were studied. Results contribute to our understanding of chemotaxonomy, physiology and biochemistry of semiochemical production and perception, integrated management of pests and beneficial species;
- new methods of the natural product (particularly lipids) total synthesis were elaborated and biological activity studied.

Computational chemistry, spectroscopy and physical organic chemistry, where

- continued the theoretical study on structure, energy, properties and reactivity of biomacromolecules and biomolecular complexes including protein-ligand complexes in the gas phase, microhydrated and hydrated phase. Static and dynamic properties are determined by molecular mechanics as well as by the state-of-the-art quantum chemical correlated ab initio calculations and by method of molecular dynamics;

- the study of interaction of metal ions with biomolecular ligands continued;

- denaturation mechanisms of model proteins were described by experimental studies and simulations;

- continued the study of an inverse heavy-atom effect on the magnitude of spin-orbit coupling in substituted biradicals, carbonyls and pyridines, study of the effect of parity violation on the zero-field splitting of the lowest triplet state of chiral biradicals, study of chromophores suitable for singlet fission, study of substituted carborate anions with high ionization energies and development of a program code for quasi-relativistic quantum-chemical calculations;

- development of new spectroscopic methods continued. For example, for the first time, methyloxirane Raman optical activity in the gas phase was measured, which is critical for computational standards and further progress of this spectroscopy. Within collaboration with the University of Calgary spectroscopy of the vibrational circular dichroism was applied for detection of DNA quadruplexes;

- the research activity was focused on the structure elucidation, stereochemistry, conformation analysis, dynamic processes and prediction of NMR and MS parameters using modern experiments and computational methods;

- the gas-phase chemistry group at the IOCB aimed to serve as a link between applied and theoretical chemists. The major topics of research deal with (i) structures and rearrangements of unusual organic and inorganic compounds, (ii) singly and multiply ions, (iii) ion solvation studied by gas-phase approaches, (iv) chemistry of redox-active compounds, (v) metal-mediated bond activation processes, and last but by no means at least (vi) oxidation catalysis.

IOCB & ICT Joint Laboratory, where

identification and characterisation of oxysterol effectors of plant enzymes and improvement of rhizosphere remediation of contaminated soils represented the main research efforts.

The purpose of the **Laboratory of Radioisotopes** was to provide the research teams of the institute with unique radioactively labeled compounds that are otherwise commercially unavailable.

b) Výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti

Výsledky vědeckých aktivit ústavu v roce 2011 shrnuje celkem 314 publikací, z toho 302 v mezinárodních impaktovaných časopisech, 1 kniha, 11 kapitol v knihách, 6 udělených patentů, 36 plnohodnotných příspěvků na konferencích a 174 abstraktů. K nejvýznamnějším výsledkům patří:

1 Poř. č.	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
1	Biochemické a NMR studie ukázaly, že proteasa opičího retroviru, který způsobuje syndrom podobný AIDS, u makaků se může unikátně sbalit ve formě monomeru. Krystalová struktura monomeru retrovirové proteasy byla vyřešena bezprecedentním způsobem	1,2
2	Zjistili jsme, že dekretovaná aspartátová proteasa Sapp1p z <i>C. parapsilosis</i> je aktivní ještě před sekrecí a že je sbalená již při průchodu buněčnou stěnou. Výskyt aktivní proteasy v buněčné stěně byl získán pomocí biotynylace, extrakce proteinů z buněčné stěny, imunochemické reakce a hmotové spektrometrie	3
3	Byla určena prostorová struktura proteasy SmCB1 z parazitické krevničky <i>Schistosoma mansoni</i> a analyzován mechanismus inhibice tohoto enzymu. Získané údaje umožňují racionální vývoj nových léčiv proti schistosomóze. (Na projektu se podílela Kalifornská univerzita v San Francisku, USA.)	6
4	Byl popsán strukturní mechanismus, kterým je inhibována aktivita zymogenu proteasy SmCB1 z parazitické krevničky <i>Schistosoma mansoni</i> . Za základě získaných údajů byl navržen a syntetizován nový typ specifického inhibitoru tohoto enzymu. (Na projektu se podílela Kalifornská univerzita v San Francisku, USA.)	7
5	Proteasa katepsin D se účastní tvorby nádorů a je prognostický marker nádorového onemocnění prsu. Byl identifikován nový mechanismus regulace enzymové aktivity katepsinu D založený na interakci s molekulami sfingolipidů a fosfosfingolipidů. (Na projektu se podílela Farmaceutická fakulta Univerzity Karlovy.)	8
6	Proteasový inhibitor IRS-2 ze slin klíštěte <i>Ixodes ricinus</i> byl analyzován na úrovni prostorové struktury a biochemické a biologické aktivity. IRS-2 má protizánětlivé účinky s potenciálním farmaceutickým využitím. (Na projektu se podílel Parazitologický ústav AV ČR a tři zahraniční výzkumné instituce.)	9
7	Vývoj nových deazapurinových nukleosidů jako nanomolárních cytostatik	5,10,11

8	Vývoj metodiky C-H arylací nukleobází	12
9	Konstrukce DNA s redoxním značením	13-16
10	Konstrukce DNA pro studium interakcí s proteiny	17
11	Vývoj chránění DNA před štěpením restrikcí endonukleázami	18,19
12	Vývoj metodiky syntéz nových typů C-nukleosidů a jejich aplikace v chemické biologii	20-24
13	Syntetické aplikace Dewarových benzenů pro syntézu oligoarylů	25
14	Využití N-oxidů v organokatalýze	26
15	Příprava nových prolékových forem adefoviru a cidofoviru s hydroxylovanými decylovými a decyloxyethylovými esterovými funkcemi a polyethylenglykolovými a dioxolenonovými estery. Dioxolenonové deriváty adefoviru vykazovaly významnou protivirovou aktivitu, zejména proti HIV a herpesvirům.	27
16	Zjištění protivirové aktivity HPMP-5azaC, jeho cyklické formy a HDE esteru proti BK viru. Srovnávací studie těchto látek s ostatními acyklickými nukleosidfosfonáty a látkou nenukleosidové povahy leftunomidem prokázala, že HDE ester cHPMP-5-azaC je zatím nejúčinnější známou látkou proti tomuto viru a současně má i nejvyšší index selektivity. Látky patří k potenciálním kandidátům na vývoj léčiva proti BK virovým nefropatiím.	28
17	Příprava 8-aza-7,9-dideazaxanthinových acyklických nukleosidfosfonátů jako inhibitorů thymidinfosforylasy.	29
18	Syntéza hydrolyticky stabilních O2 and N3-2-(fosfonomethoxy)ethylderivátů 6-fenyl and 6-pyridinyl-5-azacytosinů.	30
19	Zjištění hypometylační aktivity 2'-deoxy-5,6-dihydro-5-azacytidinu.	31
20	Byl vyvinut nový a vysoce efektivní způsob výroby diamidů (bis-amidátů) fosfonových kyselin	32
21	Byla vypracována nová metodika přípravy dialkyl-halogenalkylfosfonátů využívající Michaelis–Arbuzovovy reakce v mikrovlnném reaktoru.	33
22	Byla vypracována nová metodika syntézy 5,6-substituovaných norbornenů a 5,6-substituovaných polychlorovaných norbornenů za využití mikrovlnného reaktoru.	34
23	Byla provedena strukturně aktivní studie 9-norbornylpurinových derivátů a optimalizována jejich aktivita proti Cocksackie viru B3.	35
24	Objasněn mechanismus vzniku rezistence leukemických buněk na protinádorově účinný nukleotidový analog PMEG	4,36
25	Zjištění protivirové aktivity tenofoviru u zemědělsky významných rostlin	37
26	Studium syntézy prakticky nedostupných nukleosidů s 4'-alkoxy-pentenofuranosovým kruhem vedla k objevu nové dosud nepopsané reakce Ferrierova-typu, allylovému přesmyku 3'-deoxy-3',4'-didehydronukleosidů poskytující zmíněné 4'-alkoxy-2',3'-didehydro-2',3'-dideoxynukleosidy jako nové látky s možnou biologickou aktivitou.	38
27	Studium antibakteriálních účinků nově syntetizovaných lipofilních nukleosidfosfonátových konjugátů	39

	s iminocukry vedlo k objevu účinných antibakteriálních látek nového typu, nazvaných Lipofosfonoxidy.	
28	Pro syntézu fosfonátových analogů oligoribonukleotidů na pevné fázi v 5'→3' směru jsme vyvinuli novou chránící skupinu 2'-hydroxyly.	40
29	Objev lipofilních substrátů a inhibitorů GCPII schopných přecházet přes mozkomíšní bariéru	41
30	Nové nízkomolekulární inhibitory serinracemasy z lidského mozku	42
31	Mechanismus resistance HIV proti inhibitoru maturace bevirimatu	43
32	Nové analogy lidského insulinu s potlačenou dimerizační schopností.	47
33	Studium vlastností peptidu uvolňujícího prolaktin v hypofýze a jeho nových analogů.	48.49
34	Peptidový antagonist [D-Lys3]GHRP-6 výrazně zlepšuje obezitu a související metabolické abnormality v myším modelu postmenopauzální obezity	50
35	Působení nového neuroprotektivního inhibitoru NMDA receptoru, 3α5β-pregnanolon-glutamátu na laboratorní potkany na buněčné i behaviorální úrovni. Práce byla vytvořena společně s Fyziologickým ústavem AV ČR v. v. i. a Psychiatrickým centrem Praha.	51
36	Nové výsledky, týkající se vlivu modifikací inhibitoru NMDA receptoru, 3α5β-pregnanolon-sulfátu, v poloze 17 steroidního skeletu. Nahrazení části či celého postranního řetězce azidoskupinou nevede ke ztrátě aktivity, v některých případech aktivita roste. Práce byla vytvořena společně s Fyziologickým ústavem AV ČR, v. v. i.	52
37	Nová definice vodíkové vazby je součástí IUPAC doporučení pro rok 2011. Nutnost nové definice byla vyvolána našimi studiemi z konce minulého století kde jsem ukázali, že vodíková vazba se může prezentovat nejen červeným posunem vibračních frekvencí ale také modrým posunem. Nová definice tyto možnosti zahrnuje.	53
38	V práci byla navržena nová skórovací funkce založena na semiempirické kvantověchemické metodě PM6 – DH2X vyvinuté v naší laboratoři. Celkové skóre zahrnuje enthalpický, desolvatační, deformační a entropický člen. V uvedené studii byla metoda úspěšně aplikována na komplexy CDK2 kinázy s 9 ligandy, u kterých vystupuje jako vazebný motif halogenová vazba. Existující skórovací funkce halogenovou vazbu neumí popsat	54
39	V přehledném článku jsou shrnuty výpočty interakčních energií nekovalentních komplexů.	55
40	Popsání denaturačních mechanismů modelových proteinů pomocí simulací a experimentů	44,56
41	Objasnění ultrarychlých procesů následujících po fotoionizaci vody relevantní pro nepřímé poškozování DNA	57
42	Reduktivní štěpení O-O vazby v oxidasách: QM/MM a QM studie	58
43	Interakce kovových iontů s biomolekulárními ligandy: Jak přesné jsou vypočtené volné energie?	59
44	Mechanismus formace C-S vazby při intramolekulární disproportionaci imin disulfidů	60
45	Ionizační energie některých substituovaných karboranových anionů	61
46	Změření Ramanovy optické aktivity v plynné fázi	62
47	Spektroskopická detekce DNA kvadruplexů pomocí vibračního cirkulárního dichroismu	63
48	Určování konfigurace sulfoxidové a N-oxidové skupiny pomocí teoreticky vypočtených a experimentálních NMR	64-66

	chemických posunů	
49	Izotopová výměna vodíku H-5 u derivátů pyrimidinu a příprava tritiem značených pyrimidinů.	67-69
50	Výpočty NMR a Ramanových spekter pevných látek	68,70
51	Byla nalezena metoda pro určování poloh dvojných vazeb v lipidech pomocí HPLC/APCI-MS/MS a aplikována na analýzu komplexních směsí voskových esterů v přírodních vzorcích.	71
52	Byla vyvinuta rychlá, vysoce účinná a vysoce citlivá kapilární elektroforetická metoda pro chirální analýzu helikálních <i>N</i> -heteroaromatických dikationtů – helquatů.	72
53	Afinitní kapilární elektroforéza (ACE) a kvantově mechanická teorie funkcionálu hustoty (DFT) byly využity ke studiu nekovalentních vazebných interakcí mezi hexaarylbenzenovým receptorem (R) a ionty alkalických kovů, Rb ⁺ a Cs ⁺ , a amoniovým iontem NH ₄ ⁺ v methanolu.	73-75
54	Určení trojrozměrné struktury myšího galektinu-4	76
55	Získání strukturní informace o vazbě inhibitorů na lidský enzym karbonická anhydrasa.	77
56	Epimerizace Trögerovy báze	78
57	[6]Saddlequat: [6]helquat přistižený na racemizační cestě: Inverze chiralidy jako u gumové rukavice (spolupráce s PřF UK, VŠCHT-Praha, ICIQ-Tarragona, Španělsko)	79
58	Příprava <i>N</i> -heteroaromatických kationtů pomocí [2+2+2] cykloadice (spolupráce s PřF UK)	80
59	Preferenční krystalizace helquatu – demonstrace atraktivní metody, jak získávat enantiomery helicenoidu v multigramovém měřítku (spolupráce s PřF UK)	81
60	Review: Fotoredox katalýza s [Ru(bpy) ₃] ²⁺ jako nástroj pro transformace organických molekul. Organická syntéza využívající fotokatalyzátor v součinnosti s viditelným světlem a počátky rozvoje tohoto oboru ve 20. století.	82
61	Nové syntetické přístupy k (pentafluorsulfanyl)benzenům.	83-85
62	Příprava fluormethylénbisfosfonátů.	86,87
63	Nový reagent pro tetrafluorethylenaci.	88
64	Syntéza fluorvinylfosfonátů.	89
65	Nový design „molekulárních kleští“ schopných kvantitativně vychytávat kovy z kapalin	90
66	Vyvinuta alternativní metoda k Sonogashirově couplingu	91
67	Popsány samoskladné monovrstvy a způsob jejich přípravy	92
68	Příprava alloxazin-cykloextrinových konjugátů a studium jejich schopností katalyzovat enantioselektivní sulfoxidace	104
69	Příprava a studium vlastností cyklických [3] a [4]-pseudorotaxanů komplexovaných přechodnými kovy	105
70	Úplnou chemickou syntézou jsme připravili hmyzí defensin lucifensin, který jsme v nedávné minulosti objevili	106

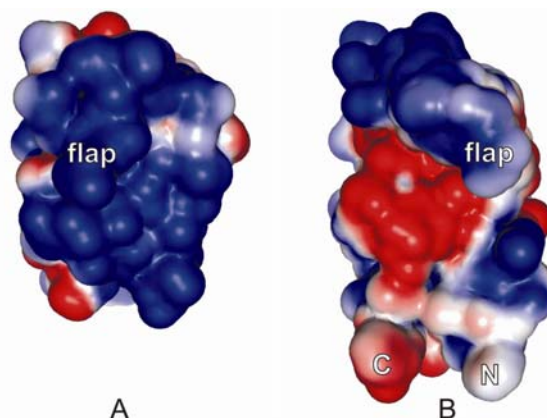
	v imunitním systému medicinálních larev používaných k léčbě nekrotických infikovaných ran diabetických pacientů. Jde o peptid složený z 40 aminokyselin, jehož řetězec je propojen třemi disulfidovými vazbami. Jsou popsány biologické a fyzikálněchemické vlastnosti tohoto peptidu.	
71	V jedu divoké eusociální včely <i>Lasioglossum laticeps</i> jsme objevili neobvyklý cyklický antimikrobiální peptid složený z 27 aminokyselin a dvou disulfidových můstků. Peptid byl syntetizován a studovány jeho biologické a fyzikálněchemické vlastnosti.	107
72	Některá analoga antimikrobiálních peptidů objevených v naší laboratoři mají silný antifungální účinek, zabíjejí kvasinky téměř okamžitě a přitom mají nízkou toxicitu vůči eukaryotním buňkám.	108
73	Charakteristika hmotnostních spekter voskových esterů a aplikace v přírodních vzorcích	71,109
74	Analýza předkopulačního chování zavíječe <i>Aphomia sociella</i>	110
75	Identifikace stopovacích a sexuálních feromonů termitů	111-115
76	Charakteristika feromonů a lipidů u čmeláků a pačmeláků	116-118
77	Popsána perhaloalkylace enoláz kovů	119
78	Shrnutí chemie triphenylcarbenium tetrafluoroboratu a tris(p-bromophenyl)aminium hexachloroantimonatu	120,121
79	Identifikace a aktivace mikroorganismů degradujících PCB v rhizosféře rostlin při fytořemediaci	122-124
80	Zvýšení schopnosti rostlin odstraňovat těžké kovy z kontaminované půdy	125-128
81	Optimalizace systému katalyzátor-solvent pro přípravu alpha-5,6-dihydro-5-aza-2'-deoxy-[6- ³ H]-cytidinu	129
82	Zavedení dvojné vazby do steroidního skeletu – příprava enol silyl etherů z vicinálních diolů	130
83	Využití neracemických helicenů při enantioselektivní hydroformylaci a allylové aminaci	131
84	Příprava helikální arylkarboxylové kyseliny a její samoskladba na povrchu kalcitu	132

c) Anotace vybraných výsledků:

Pořadové číslo anotace: 1

Krystalová struktura monomeru retrovirové proteasy vyřešená bezprecedentním způsobem

Retrovirové proteasy, které jsou nezbytné pro vznik infekčního viru, jsou aktivní ve formě homodimeru. Dosavadní inhibitory proteas, které jsou používány v klinické praxi, inhibují pouze dimerní formu proteasy. Atraktivním přístupem by bylo zabránit vzniku dimeru proteasy inhibitory dimerizace. Takové inhibitory však nejsou doposud k dispozici. Retrovirus M-PMV, který napadá makaky a způsobuje u nich syndrom podobný AIDS (SAIDS) je vhodným modelem pro vývoj léků proti AIDS. Biochemické a NMR studie ukázaly, že proteasa retroviru M-PMV se může unikátně sbalit ve formě monomeru. Pro určení krystalové struktury byl připraven mutant proteasy, u kterého nedocházelo k degradaci při přípravě krystalů. Krystalová struktura monomeru proteasy však nešla vyřešit pomocí běžných metod molekulárního nahrazení. Po mnoha letech úsilí řešení přineslo až vytvoření modelu proteasy hráči internetové hry Foldit pomocí programu mr-rosetta na sociální síti. Na základě modelu vytvořeného hráči byla vyřešena krystalová struktura monomeru proteasy, která poskytuje informace pro výchozí návrh dimerizačních inhibitorů retrovirových proteas.



(A) Krystalová struktura monomeru M-PMV proteasy, (B) struktura monomeru HIV-1 proteasy extrahovaná z dimerní formy

Citace výstupu: 1,2

Pořadové číslo anotace: 2

Inhibice trávicího enzymu parazitické krevničky jako cesta pro léčbu schistosomózy

Schistosomóza (bilharzióza) je chronické infekční onemocnění způsobené krevničkami rodu *Schistosoma*. Tyto parazitické motolice, které infikují přes 200 milionů lidí v tropických a subtropických oblastech, jsou globální zdravotní problém. V současnosti je dostupný jediný lék proti schistosomóze a hrozba vzniku rezistence vyžaduje hledání nových účinných chemoterapeutik. Dospělé krevničky žijí v cévách hostitele a jejich hlavním potravním zdrojem jsou proteiny přijaté z krve. Klíčovou úlohu při trávení proteinů ve střevě krevničky hraje proteolytický enzym katepsin B1 (SmCB1), který tak představuje vhodnou cílovou molekulu pro terapeutický zásah. Pomocí rentgenové krystalografie jsme vyřešili první prostorovou strukturu SmCB1 a to ve formě komplexů s peptidomimetickými inhibitory (viz obrázek). Funkční biochemická analýza umožnila popsat vztahy mezi strukturou SmCB1, enzymovou aktivitou a inhibicí aktivity. Dále jsme prokázali, že peptidomimetické inhibitory SmCB1 jsou toxické pro krevničku. Získané výsledky otevírají cestu pro racionální vývoj inhibičních molekul jako potenciálních nových léčiv proti schistosomóze.



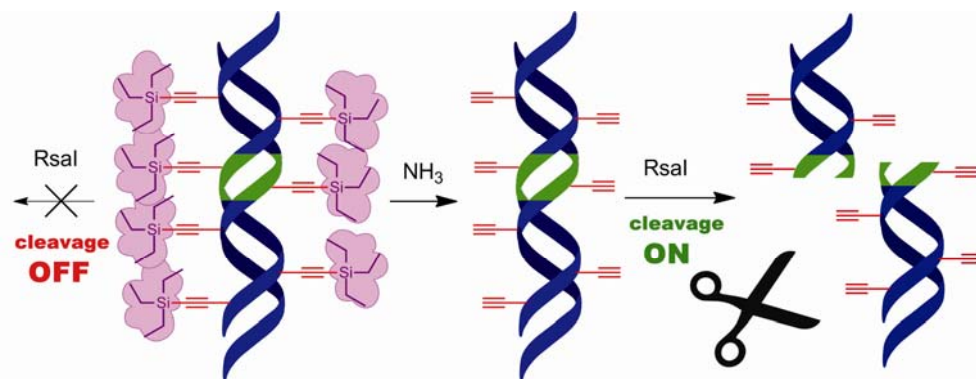
Pár dospělých krevniček *Schistosoma mansoni* (menší je samička); Vpravo: prostorová struktura enzymu SmCB1 interagujícího se syntetickým inhibitorem.

Citace výstupu: 6, 7

Pořadové číslo anotace: 3

Chemické chránění DNA před enzymatickým štěpením

Byla vyvinuta dvoukroková velmi jednoduchá metodika přípravy chráněné DNA, která sestává ze syntézy chráněných nukleosid trifosfátů a jejich enzymatické inkorporace do DNA polymerasou. Pomocí PCR lze připravit DNA, ozdobenou objemnými chránicími skupinami ve velkém žlábkku, o jakékoli délce a sekvenci. Takto chráněná DNA je resistantní vůči štěpení restrikcími endonukleasami, i když obsahuje sekvence specifické pro daný enzym. Reakcí s amoniakem jsou ale všechny objemné silylové skupiny odštěpeny a vzniklá DNA modifikovaná pouze malými ethynylovými skupinami už je rozpoznatelná enzymy a podléhá štěpení. Jedná se o první příklad přepínatelného chránění DNA před štěpením a v obecné rovině i před specifickou vazbou proteinu. Přepínání štěpitelnosti by mohlo být užitečné v molekulární biologii pro manipulace dlouhých úseků DNA, kde se daná rozpoznávací sekvence může vyskytovat v několika kopiích.



První příklad přepínatelného chránění DNA před štěpením a v obecné rovině i před specifickou vazbou proteinu

Citace výstupu: 18, 19

d) Domácí a zahraniční ocenění zaměstnanců pracoviště

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
1	Antonín Holý	Stříbrná medaile Senátu ČR	Za mimořádné zásluhy ve výzkumu a vývoji léčiv	Senát ČR
2	Petr Cígler	Cena A. Badera	Cena za rok 2011 za bioorganickou a bioanorganickou chemii	ČSCH
3	Petr Jansa	Prix Sanofi de pharmacie 2011	Výzkum v oblasti farmaceutické chemie	Sanofi-Aventis
4	Petr Jansa	Zvaná přednáška na 25. výročí objevu antivirálních fosfonátů nukleosidů v Praze	Přednáška "Acyclic nucleoside phosphonates: current state of the art"	UOCHB, Gilead Sciences
5	Vladimír Vrkoslav	Soutěž o nejlepší práci v oboru spektroskopie mladých autorů (do 35 let) – první místo	Soubor publikací	Spektroskopická společnost Jana Marka Marci
6	Detlef Schroeder	Miloš-Hudlický Award of the <i>Czech Chemical Society</i>	Článek	Czech Chemical Society
7	Tomáš Elbert	IIS-CED Award 2011	Vědecký poradce výboru IIS-CED, výzkum v oblasti syntézy sloučenin značených radioisotopy	Výbor International Isotope Society - Central European Division
8	Kateřina Polívková	Cena MŠMT	FameLab, popularizace vědy	MŠMT

Další specifické informace o pracovišti

Vzhledem k tomu, že celkové hodnocení ústavu v roce 2011 bylo vynikající a neobsahovalo žádné kritické body, bylo obtížné přijímat jakákoli nápravná opatření. Většina vědeckých týmů, které byly hodnoceny nižší známkou, jsou nově založené juniorské skupiny, a hodnotící panel správně vyzvedává snahu ústavu o podporu mladých, perspektivních vědeckých pracovníků.

Vedení ústavu se však s touto chválou nespokojuje a je si vědomo, že všechny útvary ústavu nejsou stejně kvalitní. Proto ve shodě s vlastními dlouhodobými principy interní evaluace provedeme v létě 2012 detailní evaluaci jednotlivých týmů za účasti International Advisory Board. Cílem těchto interních evaluací bude posoudit, zda jednotlivé útvary dosahují srovnatelné evropské úrovně. Hodnotit se bude nejen výzkum prováděný za posledních 5 let, ale i vědecké plány na další pětileté období. V případě neúspěchu v interních evaluacích se bude zvažovat ukončení činnosti těchto týmů.

Ústav efektivně spolupracuje s dceřinou společností IOCB TTO, s.r.o. při zajišťování převodu výsledků základního výzkumu do komerční praxe.

Detlef Schroeder byl jmenován šéfredaktorem (Editor-in-Chief) časopisu *International Journal of Mass Spectrometry* (Elsevier B.V.), stal se i členem ediční rady časopisu *ChemPlusChem* a řádným členem Učené společnosti České Republiky.

V roce 2011 byly v Laboratoři radioisotopů připraveny následující sloučeniny značené radionuklidy pro potřeby výzkumných týmů z ÚOCHB :

I. Peptidy značené radionuklidem ^{125}I :

$[^{125}\text{I}]\text{PrRP-31 rat}$	1 šarže, celková aktivita 0,71 mCi	pro tým Dr. Maletínské,	ÚOCHB
$[^{125}\text{I}]\text{CART(61-102)}$	2 šarže, celková aktivita 1,72 mCi	pro tým Dr. Maletínské,	ÚOCHB
$[^{125}\text{I}]\text{DAPA-3-Ghrelin}$	1 šarže, celková aktivita 0,44 mCi	pro tým Dr. Maletínské,	ÚOCHB
$[^{125}\text{I}]\text{Ghrelin}$	1 šarže, celková aktivita 0,76 mCi	pro tým Dr. Maletínské,	ÚOCHB
$[^{125}\text{I}]\text{Tyr}^1\text{NPFF}$	1 šarže, celková aktivita 0,40 mCi	pro tým Dr. Maletínské,	ÚOCHB
$[^{125}\text{I}](1\text{DMe})\text{Y8Fa}$	1 šarže, celková aktivita 0,75 mCi	pro tým Dr. Maletínské,	ÚOCHB

U $[^{125}\text{I}]\text{Tyr}^1\text{NPFF}$ a $[^{125}\text{I}](1\text{DMe})\text{Y8Fa}$ byla pomocí radio-HPLC sledována stabilita preparátů během inkubace s imobilizovanými buňkami.

II. Analoga nukleotidů značené radionuklidem ^3H :

4-amino-7-(D-ribofuranosyl)-5-([5- ^3H])thiophen-2-yl)-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine	31 mCi	pro tým dr. Hocka, ÚOCHB
--	--------	--------------------------

V rámci řešení grantu IAA400550801 byly připraveny brassinosteroidy značené radionuklidem ^3H pro Laboratoř růstových regulátorů ÚEB :

24-[3- ^3H]epicastasteron 1 šarže, 1,25 mCi
 24-[3- ^3H]epibrassinolid 1 šarže, 0,22 mCi

Vzdělávací činnost

- a) 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	Biochemie	Př.F. UK Praha	ANO		ANO		Laboratorní kurs
2	Organická chemie (c-biol)	Př.F. UK Praha	ANO				
3	Organická chemie (KATA)	Př.F. UK Praha	ANO				
4	Organická chemie (A)	Př.F. UK Praha	ANO				
5	Biochemie	VŠCHT Praha		ANO	ANO		
6	Biochemie a biotechnologie	VŠCHT Praha			ANO		
7	Bioorganická chemie	UP Olomouc	ANO				
8	Organická chemie	VŠCHT Praha			ANO		
9	Klinická a toxikologická analýza	Př.F. UK Praha	ANO		ANO		
10	Jaderná chemie	FJFI, ČVUT Praha			ANO		
11	Farmacie	Farmac. fakulta UK			ANO		
12	Chemie v přírodních vědách	Př.F. UK Praha			ANO		
13	Zoologie	Př.F. UK Praha			ANO		

1 Číslo	2 Magisterský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Chemie	VŠCHT Praha			ANO		
2	Buněčná biologie	Př.F. UK Praha			ANO		
3	Biochemie	Př.F. UK Praha	ANO		ANO		
4	Molekulární biologie a biochemie	Př.F. UK Praha			ANO		
5	Biochemie	VŠCHT Praha	ANO		ANO		
6	Bioorganická chemie	VŠCHT Praha	ANO				
7	Organická syntéza III	PřF UK Praha	ANO				
8	Seminář z organické chemie	PřF UK Praha		ANO			
9	Bioorganická chemie	UP Olomouc	ANO				
10	Organická chemie	VŠCHT Praha			ANO		
11	Organická chemie	PřF UK Praha	ANO		ANO		
12	Klinická a toxikologická analýza	Př.F. UK Praha	ANO		ANO		
13	Všeobecné lékařství	1LF UK Praha	ANO		ANO		
14	Fyziologie živočichů	PřFUK Praha			ANO		
15	Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur	PřF UK Praha	ANO	ANO	ANO	ANO	Organizace obhajob
16	Fyzika	MFF UK Praha	ANO	ANO	ANO	ANO	
17	Modelování komplexních molekulových systémů a biomolekul	PřF UK Praha	ANO		ANO		
18	Kurs NMR 1	PřF UK Praha	ANO	ANO			
19	Kurs NMR 2	PřF UK Praha	ANO				
20	Analytická chemie	PřFUK Praha	ANO		ANO		
21	Chemie životního prostředí	PřFUK Praha			ANO		
22	Biofyzika	MFF UK, Praha	ANO				
23	Biotechnologie léčiv	VŠCHT Praha			ANO		
24	Klinická bioanalýtika	VŠCHT Praha			ANO		
25	Zoologie	PřF UK Praha	ANO	ANO	ANO		
26	Ochrana lesa	ČZU, Praha-Suchbát	ANO	ANO			
27	Chemoekologie	ČZU, Praha-Suchbát	ANO				
28	Chemie a analýza potravin	VŠCHT Praha	ANO				

1 Číslo	2 Doktorský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Mikrobiologie	VŠCHT Praha			ANO		
2	Biochemie	Př.F. UK Praha	ANO		ANO		
3	Biochemie	VŠCHT Praha			ANO		
4	Chemie	VŠCHT Praha	ANO	ANO	ANO	ANO	
5	Biochemie a patobiochemie	1. LF UK Praha			ANO		
6	Organická chemie	PřF UK Praha			ANO		
7	Organická chemie	VŠCHT Praha			ANO		
8	Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur	PřF UK Praha	ANO	ANO	ANO	ANO	Organizace obhajob
9	Molekulová fyzika	MFF UK Praha	ANO	ANO	ANO	ANO	
10	Fyzikální a makromolekulární chemie				ANO		
11	Analytická chemie	PřFUK Praha	ANO		ANO		
12	Buněčná a molekulární biologie	PřF UK Praha			ANO		
13	Zoologie	PřF UK Praha			ANO		
14	Organic Chemistry	TU Braunschweig (Německo)			ANO		
15	Chemie - organická chemie	MU Brno			ANO		

b) Účast pracoviště na sekundárním vzdělávání (středoškolská výuka)

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel/škola	4 Činnost
1	Výuka chemie (Jiří Blažek)	Střední odborná škola stavební a obchodní akademie Kladno	Výuka chemie
2	Zapojení 3 středoškolských studentů do vědeckého programu skupiny dr. Krečmerové	ÚOCHB (Jiří Blažek) a Střední odborná škola	Praktická laboratorní činnost

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel/škola	4 Činnost
		stavební a obchodní Kladno	
3	SOC	Gymnázium Ústavní	Vedení práce
4	SOC	Masarykova střední škola chemická	1. cena v soutěži
5	Otevřená věda	AVČR	2 stáže středoškolských studentů na ÚOCHB
6	Den osobností 2011	Gymnasium Arabská	Přednáška „Chemická komunikace v živé přírodě“

c) Vzdělávání veřejnosti

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel	4 Činnost
1	Přednáška pro středoškolské učitele chemie a biologie	AV ČR	Přednáška
2	Podzimní škola pro středoškolské učitele	UOCHB, CSBMB	Dvoudenní přednáškový cyklus
3	Pátečník	Přednáškové dopoledne na UPOL	Universita Palackého Olomouc
4	'Status quo und Zukunft von Exzellenz in the Tschechischen Republik' Bilingual presentation at the discussion <i>Excellence ve vědě a vzdělávání</i> , Prague, Czech Republic, 9. November 2011.	Humboldt-Klub	Přednáška
5	Popularizační přednáška na Gymnáziu v Poděbradech	Gymnázium Jiřího z Poděbrad:	Přednáška o současné chemii

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel	4 Činnost
6	FameLab	British Council	Přednášky v rámci soutěže FameLab
7	Televizní akademie	ČT	Popularizační přednáška
8	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.

Činnost pro praxi

a) Výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů

Pořadové číslo: 1

Dosažený výsledek: Úspěšná syntéza a optimalizace syntézy Tenofovir diisopropoxyl fumarátu

Uplatnění/Citace výstupu: léčivo

Název projektu /programu v češtině: vývoj Tenofovir diisopropoxyl fumarátu

Název projektu/programu v angličtině: Development of Tenofovir diisopropoxyl fumarate

Poskytovatel: ÚOCHB

Partnerská organizace: Zentiva, k. s.

Pořadové číslo: 2

Dosažený výsledek: Nový způsob exprese rekombinantních proteinů v hmyzích buňkách

Uplatnění/Citace výstupu: hospodářská smlouva s firmou Vidia s. r.o.

Název projektu /programu v češtině: Centrum nových virostatik a cytostatik

Název projektu/programu v angličtině: Center for new antivirals and antineoplastics

Poskytovatel: MŠMT

Partnerská organizace: Vidia s.r.o.

b) Významné patenty, užité vzory, vynálezy, licenční smlouvy, ochranné známky

Pořadové číslo: 1

Název česky: Pyrimidinové sloučeniny inhibující tvorbu oxidu dusnatého a prostaglandinu E2, způsob výroby a použití

Název anglicky: Pyrimidine compounds inhibiting nitric monoxide and prostaglandine E2, method of their production and usage

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: PV2011-103

Popis česky: Vynález se týká polysubstituovaných pyrimidinových derivátů vykazujících duální snížení produkce oxidu dusnatého (NO) a prostaglandinu E2 (PGE2) a jejich použití jako léčiva

Popis anglicky: This invention concerns polysubstituted pyrimidine derivatives causing dual decrease of a nitric monoxide (NO) production and prostaglandine E2 (PGE2) production and their usage as a medicament

Využití: Pro léčbu onemocnění, která jsou vyvolána či je jejich závažnost umocňována nadprodukcí NO a/nebo prostaglandinu E2, zejména pak zánětlivých onemocnění

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Zlatko Janeba, 220183143, janeba@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 2

Název česky: Deriváty pregnanolonu substituované v poloze 3 alfa kationickou skupinou, způsob jejich výroby, jejich použití a prostředek je obsahující

Název anglicky: Pregnanolone derivatives substituted in position 3 alpha by cationic group, method of their production, usage and pharmaceutical preparation involving them

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-81

Popis česky: Vynález se týká derivátů pregnanolonu substituovaných v poloze 3 alfa, které mají v této poloze skupinu schopnou vytvořit kation. Takové deriváty mohou být užitečné pro léčení některých onemocnění centrálního nervového systému (CNS).

Popis anglicky: This invention deals with pregnanolone derivatives substituted in 3alpha-position, having here a group which is able to create a cation. These derivatives may be beneficial in treatment of several central nervous system (CNS) diseases.

Využití: Léčba ischemického poškození CNS, neurodegenerativních změn a poruch, afektivní poruchy, deprese, post-traumatické stresové poruchy (PTSD) a nemocí souvisejících se stresem, anxieta, schizofrenie a psychotické poruchy, bolesti, závislosti a roztroušené sklerózy, epilepsie a gliomů i jiných nádorů centrální nervové soustavy.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Hana Chodounská, 220183316, chodounska@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 3

Název česky: Inhibitory karbonické anhydrasy, způsob jejich přípravy

Název anglicky: Carbonic anhydrase inhibitors, method of their production

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-676

Popis česky: Vynález popisuje nové deriváty klastrových sloučenin boru a jejich specifický inhibiční účinek na enzym karbonickou anhydrazu IX, bílkovinu nadprodukovanou v rakovinných tkáních. Vynález se týká i způsobu syntézy a využití zmíněných derivátů.

Popis anglicky: This invention deals with new derivatives of borone cluster compounds and their specific inhibitory effect targeting enzyme carbonic anhydrase IX, a protein overproduced in cancer tissues. Moreover it concerns a method of their production and usage.

Využití: Inhibitory lidské karbonické anhydrasy IX podle vynálezu mohou být účinnou složkou farmaceutických prostředků pro léčení nádorových onemocnění.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Pavlína Maloy - Řezáčová, 220183144, rezacova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 4

Název česky: Simulátor trávicího traktu

Název anglicky: Digestive tract simulator

Kategorie: udělený patent, chemie

Zapsán pod číslem: CZ 302422

Popis česky: Simulátor trávicího traktu člověka, tvořený soustavou deformovatelných elastických komor, udržovaných za provozu zařízení při stálé teplotě a opatřených vývody pro vzájemné propojení, vývody pro připojení čidel a vývody pro odběr vzorků či doplňování pracovního roztoku.

Popis anglicky: The invention relates to the simulation of the human digestive system, consisting of a set of two deformable chambers kept at constant temperature during operation and formed by interconnected elastic bags. Each of the bags is equipped by outlets for hydraulic interconnection, by outlets for measuring probes connection and by outlets for sample withdrawal and refilling of titration solvent.

Využití: Věrný model trávicího traktu člověka, jednotlivé části jsou snadno vyměnitelné. Použití- lékařské a farmaceutické studie.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail) Petr Mudra, 220183557, mudra@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554, souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 5

Název česky: Samoorganizující se monomolekulární vrstva

Název anglicky: Self-assembled monolayer and method of its preparation

Kategorie: udělený patent, chemie

Zapsán pod číslem: CZ 302441

Popis česky: Patent se týká nového typu tenkého organického filmu na anorganickém povrchu a konkrétně specifické samoorganizující se monomolekulární vrstvy a způsobu její přípravy.

Popis anglicky: Deals with a new type of a thin organic layer on an inorganic surface, and specifically, with a self-assembled monomolecular layer (self-assembled monolayer) and a method of its preparation.

Využití: Samoorganizující se monomolekulární vrstvy trialkylcínu, adsorbované na kovem pokrytý substrát prostřednictvím atomu cínu, jsou použitelné například jako aktivní složky elektronických součástek.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Josef Michl, Lad. Součková, 220183554, souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 6

Název česky: Způsob detekce molekul RNA polyadenylovaných na 3' konci a molekul RNA, které obsahují uvnitř řetězce úseky těsně za sebou následujících adeninů, za použití 5-bromo-2'-deoxyuridinu, 5-iodo-2'-deoxyuridinu a 5-chloro-2'-deoxyuridinu ve formě trifosfátů v permeabilizovaných buňkách a tkáních a na řezech buňkami nebo tkáněmi

Název anglicky: Method for detection of RNA molecules polyadenylated at 3' end and molecules of RNA which contain inside the chain stretch of closely following adenines using 5-bromo-2'-deoxyuridine, 5-iodo-2'-deoxyuridine and 5-chloro-2'-deoxyuridine in the form of tri-phosphates in permeabilized cells and tissues and cellular or tissue cross-sections.

Kategorie: udělený patent, chemie

Zapsán pod číslem: CZ 302613

Popis česky: způsob detekce sekvencí ribonukleových kyselin prostřednictvím syntézy DNA *in situ* jak v permeabilizovaných buňkách a tkáních, tak na řezech buněk a tkání pomocí reverzní transkripce, značených nukleotidů stabilizujících vzniklý duplex tvořený řetězcem ribonukleové kyseliny (RNA) a deoxyribonukleové kyseliny (DNA), a krátkého oligonukleotidového fragmentu

Popis anglicky: The discovery deals with a method of detection of sequences of ribonucleic acids using DNA synthesis *in situ* both in permeabilized cells or tissues and in cellular and tissue cross-sections with the use of reverse transcription, labeled nucleotides which stabilize the formed duplex made of the chain of ribonucleic acid (RNA), and deoxyribonucleic acid (DNA), and short oligonucleotide fragment.

Využití: uplatnění při diagnóze změn u patologických stavů jednotlivých buněk a tkání, je tento přístup využitelný v základním výzkumu. Je možné předpokládat uplatnění popsaného přístupu včetně použití stabilizačního vlivu uvedených nukleotidů pro produkci sad pro rychlou detekci molekul RNA

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ivan Rosenberg, 220183381, ivan@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554, souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 7

Název česky: Způsob přípravy substituovaných nitrofenylsulfurpentafluoridů

Název anglicky: Method for preparation of substituted nitrophenyl-sulfur-pentafluorides

Kategorie: udělený patent, chemie

Zapsán pod číslem: CZ 302794

Popis česky: Způsob přípravy substituovaných nitrofenylsulfurpentafluoridů obecného vzorce **2** zástupnou nukleofilní aromatickou substitucí za vodík. Vynález zahrnuje i následné chemické modifikace primárních produktů.

Popis anglicky: The discovery deals with a method for preparation of substituted nitro-phenyl-sulfur-pentafluorides using nucleophilic aromatic substitution for hydrogen. The discovery includes also other chemical modifications of primary products.

Využití: Pro výrobu kapalných krystalů, energetických materiálů, polymerů, agrochemikálií a biologicky aktivních látek pro farmaceutický průmysl.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Petr Beier, 220183267, beier@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554, souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 8

Název česky: Způsob výroby substituovaných diamidů fosfonových kyselin

Název anglicky: Method for production of substituted diamides of phosphonic acids

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-26

Popis česky: Vynález se týká způsobu výroby diamidů fosfonových kyselin z bis(trialkylsilyl)esterů příslušných fosfonových kyselin

Popis anglicky: The discovery is focused on the method of production of diamides of phosphonic acids from bis(trialkylsilyl) esters of original phosphonic acids.

Využití: Způsob výroby podle předkládané přihlášky vynálezu lze použít pro přípravu proléčiv biologicky aktivních fosfonových kyselin

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Zlatko Janeba, 220183143, janeba@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554, souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 9

Název česky: Způsob kompletní degradace a deaktivace organofosfátových a organofosfonátových pesticidů, herbicidů, polutantů, nervově paralytických látek a jejich prekurzorů

Název anglicky: Method for complete degradation and deactivation of organophosphate and organophosphonate pesticides, herbicides, pollutants, nerve paralyzing compounds and their precursors

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-325

Popis česky: Vynález se týká způsobu kompletní degradace a deaktivace organofosfátových a organofosfonátových pesticidů, herbicidů, polutantů, nervově paralytických látek a jejich prekurzorů pomocí mikrovlnně zahřívané hydrolýzy v přítomnosti i nepřítomnosti kyselin

Popis anglicky: The discovery deals with a method of complete degradation and deactivation of organophosphate and organophosphonate pesticides, herbicides, pollutants, nerve paralyzing compounds and their precursors using microwave heated hydrolysis in the absence of acids.

Využití: ke kompletní degradaci a deaktivaci organofosfátových a organofosfonátových pesticidů, insekticidů, herbicidů, léků, polutantů, nervově paralytických látek a jejich prekurzorů pomocí mikrovlnně zahřívání hydrolýzy. Dále je využitelný k odmořování znečištěných vod a k preventivní úpravě pitné vody.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Zlatko Janeba, 220183143, janeba@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554, souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 10

Název česky: Použití acyklického nukleosidfosfonátu tenofoviru, k eliminaci rostlinných ssDNA virů

Název anglicky: Use of acyclic nucleosidphosphonate, tenofovir, for the elimination of plant ssDNA viruses

Kategorie: Pořadové číslo: 10

Název česky: Použití acyklického nukleosidfosfonátu tenofoviru, k eliminaci rostlinných ssDNA virů

Název anglicky: Use of acyclic nucleosidphosphonate, tenofovir, for the elimination of plant ssDNA viruses

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-274

Popis česky: Vynález se týká použití tenofoviru, (R)-PMPA, ve formě přídatku do živných médií *in vitro*, popřípadě do postřiku, injekce či závlivy do půdy, k eliminaci jednovláknových, tedy ssDNA rostlinných virů z rostlin a jejich částí a také prostředí s obsahem této účinné látky.

Popis anglicky: The discovery deals with use of tenofovir, (R)-PMPA, in the form of additive to growth media *in vitro*, alternative addition, injection or watering into soil for the elimination of single chain, ssDNA plant viruses and their parts and also as a tool with a content of this compound.

Využití: Inhibitory lidské karbonické anhydrasy IX podle vynálezu mohou být účinnou složkou farmaceutických prostředků pro léčení nádorových onemocnění.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ivan Votruba, 220183209, Ivan.Votruba@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554, souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 11

Název česky: Způsob zpřístupnění specifických pyrimidinových nukleosidů ve struktuře dvouřetězcové DNA pro reakci s protilátkami, které s těmito nukleosidy reagují

Název anglicky: Method of enabling access to specific pyrimidine nucleosides in the structure of double-strand DNA for the reaction with antibodies which interacts with these nucleosides

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-308

Popis česky: Vynález se týká použití tenofoviru, (R)-PMPA, ve formě přídatku do živných médií *in vitro*, popřípadě do postřiku, injekce či zálivky do půdy, k eliminaci jednovláknových, tedy ssDNA rostlinných virů z rostlin a jejich částí a také prostředku s obsahem této účinné látky.

Popis anglicky: The discovery deals with the method of enabling access to specific pyrimidine nucleosides in the structure of double-strand DNA for their subsequent reaction with antibodies. Examples of such nucleosides are 5-bromo-2'-deoxyuridine, 5-chloro-2'-deoxyuridine, 5-jodo-2'-deoxyuridine or 5-metyl-2'-deoxycytidine

Využití: Způsob zpřístupnění specifických pyrimidinových nukleosidů ve struktuře dvouřetězcové DNA podle předkládaného vynálezu lze využít v případech, kdy je důležité šetrné zpřístupnění nukleosidů ve struktuře DNA pro reakci se specifickými protilátkami. V této souvislosti je možné mimo jiné předpokládat včlenění tohoto způsobu a jednotlivých použitých látek do komerčně dostupných sad na detekci replikace DNA. Vzhledem k relativní jednoduchosti zpřístupnění dostupných halogenových derivátů tymidinu, např. BrdU v DNA, je pravděpodobné využití popsaného způsobu při izolacích značených DNA a s nimi asociovaných proteinů.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ivan Rosenberg, 220183381, ivan@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554, souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 12

Název česky: Způsob zpřístupnění specifických pyrimidinových nukleosidů ve struktuře dvouřetězcové DNA pro reakci s protilátkami, které s těmito nukleosidy reagují

Název anglicky: Method of enabling access to specific pyrimidine nucleosides in the structure of double-strand DNA for the reaction with antibodies which interacts with these nucleosides

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-308

Popis česky: Vynález se týká použití tenofoviru, (R)-PMPA, ve formě přídatku do živných médií *in vitro*, popřípadě do postřiku, injekce či zálivky do půdy, k eliminaci jednovláknových, tedy ssDNA rostlinných virů z rostlin a jejich částí a také prostředku s obsahem této účinné látky.

Popis anglicky: The discovery deals with the method of enabling access to specific pyrimidine nucleosides in the structure of double-strand DNA for their subsequent reaction with antibodies. Examples of such nucleosides are 5-bromo-2'-deoxyuridine, 5-chloro-2'-deoxyuridine, 5-jodo-2'-deoxyuridine or 5-metyl-2'-deoxycytidine

Využití: Způsob zpřístupnění specifických pyrimidinových nukleosidů ve struktuře dvouřetězcové DNA podle předkládaného vynálezu lze využít v případech, kdy je důležité šetrné zpřístupnění nukleosidů ve struktuře DNA pro reakci se specifickými protilátkami. V této souvislosti je možné mimo jiné předpokládat včlenění tohoto způsobu a jednotlivých použitých látek do komerčně dostupných sad na detekci replikace DNA.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ivan Rosenberg, 220183381, ivan@uochb.cas.cz,, Lad. Součková, 220183554,
souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 13

Název česky: Způsob značení dvouřetězcových molekul DNA

Název anglicky: Method of labeling of double-strand molecules of DNA

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-309

Popis česky: Vynález se týká způsobu značení dvouřetězcové DNA. V přihlášce je popsán způsob, který dovoluje rychle a efektivně inkorporovat značené nukleotidy do dvouřetězcových molekul DNA..

Popis anglicky: The discovery deals with a method of labeling of double-strand molecules of DNA In the application is described a method which allows fast and effective incorporation of labeled nucleotide into double.strand molecules of DNA.

Využití: Způsob značení dvouřetězcové DNA podle předkládaného vynálezu lze využít v případech, kdy je důležité selektivní a citlivé značení DNA. V této souvislosti je možné mimo jiné předpokládat včlenění této procedury a jednotlivých použitých látek do sad na detekci DNA. Současně je možné použití pro přípravu hybridizačních DNA prób.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ivan Rosenberg, 220183381, ivan@uochb.cas.cz,, Lad. Součková, 220183554,
souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 14

Název česky: Lipofosfonoxiny, jejich příprava a použití

Název anglicky: Lipophosphonoxines, their preparation and use

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-312

Popis česky: Vynález se týká nových látek s antibakteriálními účinky, způsobu jejich syntézy a jejich využití *in vitro* a *in vivo*

Popis anglicky: The discovery deals with new compounds with antibacterial properties, methods of their synthesis and use both *in vitro* and *in vivo*

Využití: Lipofosfonoxiny podle tohoto vynálezu mohou být jako antibakteriální činidla účinnou složkou farmaceutických prostředků pro léčení bakteriálních infekcí, součástí desinfekčních prostředků, , a/nebo selektivních kultivačních médií.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Dominik Rejman, 220183371, Dominik.Rejman@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554,
souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 15

Název česky: Způsob eliminace antigenních vlastností 5-etynyl-2'-deoxyuridinu a 5-etynyluridinu při detekci nukleových kyselin

Název anglicky: Method of enabling access to specific pyrimidine nucleosides in the structure of double-strand DNA for the reaction with antibodies which interacts with these nucleosides

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-324

Popis česky: Vynález se týká použití tenofoviru, (*R*)-PMPA, ve formě přídatku do živných médií *in vitro*, popřípadě do postřiku, injekce či závlaky do půdy, k eliminaci jednovláknových, tedy ssDNA rostlinných virů z rostlin a jejich částí a také prostředku s obsahem této účinné látky.

Popis anglicky: The discovery deals with the method for the elimination of 5-etynyl-2'-deoxyuridine a 5-etynyluridine as antigens recognized by antibodies reacting with these compounds. The approach allows for targeted elimination of antigenic properties of 5-etynyl-2'-deoxyuridine a 5-etynyluridine which would complicate e.g. the detection of replicated DNA or newly synthesized RNA.

Využití: Způsob eliminace EdU a EU jako antigenu rozeznávaného protilátkami reagujícími s uvedenými molekulami je využitelný v případech, kdy je nutné provádět několikanásobné detekce pomocí protilátek namířených proti strukturně podobné, současně detekované molekule. Jedná se např. o současnou lokalizaci BrdU a EdU nebo BrU a EU. V této souvislosti je možné mimo jiné předpokládat včlenění této procedury a jednotlivých použitých látek do sad pro detekci DNA nebo RNA.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ivan Rosenberg, 220183381, ivan@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554,

souckova@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 16

Název česky: Deriváty insulinu s cyklickou strukturou v C-konci B-řetězce

Název anglicky: Derivatives of insulin with a cyclic structure in the C-end of B-chain

Kategorie: přihláška vynálezu, chemie

Zapsán pod číslem: 2011-803

Popis česky: Vynález se týká nových derivátů insulinu s vysokou vazebnou afinitou vůči receptoru insulinu, způsobu jejich syntézy a případného použití *in vivo*

Popis anglicky: The discovery deals with new derivatives of insulin with high binding affinity to the insulin receptor, method of their synthesis and possible use *in vivo*.

Využití: Deriváty insulinu podle tohoto vynálezu mohou být účinnou složkou farmaceutických prostředků pro léčení diabetu, tzn. pro snižování koncentrace krevní glukózy u nemocných cukrovkou.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Jiří Jiráček, 220183438, Jiri.Jiracek@uochb.cas.cz, Lad. Součková, 220183554,

souckova@uochb.cas.cz

c) Výsledky spolupráce se státní a veřejnou správou

Pořadové číslo: 1

Dosažený výsledek: Participace na grantu MVČR „Cílený vývoj léčiv použitelných k ochraně obyvatelstva před bioterorismem.“

Spolupráce s Centrem biologické ochrany Těchonín

Oblast uplatnění výsledku: Ochrana obyvatelstva před bioterorismem

Uživatel/Zadavatel: Armáda ČR

d) 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, DFG	70
2	Posudky grantů a řešení Centrum, NPVII, NAZV	MŠMT, MZe	20
3	Posudky na diplomové a disertační práce	Vysoké školy	80

Celkový počet zpracovaných expertiz

170

Mezinárodní vědecká spolupráce pracovišť

a) 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 Koordinátor/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
1	HFSP	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	
2	NHMRC	National Health and Medical Research Council Progr./Australia	Development of purine nucleoside phosphonates as antimalarial drugs targeting nucleoside synthesis in plasmodium	koordinátor: Luke Guddat, Univ. of Queensland, řešitel ÚOCHB: Holý	Austrálie/2, ČR/1, Belgie/1	Austrálie, Belgie	
3	IAEA	Resolution of cryptic species complexes of Tephritid pests	Analysis of Epicuticular Composition in Genera Anastrepha and Ceratitis	Koordinátor - A. Jessup, IAEA řešitel ÚOCHB - Kalinová		Argentina, Brazílie, Rakousko, Nový Zéland, Columbie, Thajsko, Austrálie, Belgie, Francie, Keňa, Itálie, Malajsie, Mexiko, Čína, Tanzánie, USA, Řecko, ČR	výzkum
4	IAEA	Area-wide Suppression of Native Insect Plant Pests to Reduce Insecticide	Chemical Ecology of African Ceratitis Far Complex	Koordinátor – J. Hendrichs řešitel ÚOCHB - Hoskovec		Argentina, Brazílie, Rakousko, Nový Zéland, Columbie, Thajsko, Austrálie, Belgie, Francie, Keňa, Itálie,	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
		Use and Facilitate International Trade				Malajsie, Mexiko, Čína, Tanzánie, USA, Řecko, ČR	
5	MŠMT	INGO/INGO	Členství ve vědecké radě Středoevropské divize International Isotope Society/ Membership in Scientific Committee of the Central Europe Division of International Isotope Society	Elbert			
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	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	
8	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Dvou a trojrozměrná pole molekulárních rotorů: Nové materiály pro	Vacek	Josef Michl, University 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
			nanotechnologie/2&3-D Arrays of Molecular Rotors:New Materials for Nanotechnology		Colorado, Boulder		
9	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Chemie na atmosférických površích: Výzkum na molekulární úrovni pomocí laboratorních experimentů a počítačových simulací/Chemistry of atmospheric surfaces: Molecular level investigation using laboratory experiments and computer simulations	Roeselová	Barbara J. Finlayson-Pitts, Univ. of California, Irvine	USA	
10	MŠMT	COST/ COST	Funkční proteomika obranných proteinů rostlin/Functional proteomics of plant defense proteins	Nussbaumerová/ Mareš		COST akce "Plant proteomics in Europe" (EUPP)	
11	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Příprava peptidomimetických profarmak acyklických nukleosidfosfonátů jako antivirotik se zvýšenou biologickou využitelností/Preparation of Peptidomimetic Prodrugs of Acyclic Nucleoside Phosphonates as Antivirals with Improved Bioavailability	Krečmerová	University of Southern Kalifornia, Ch. McKenna	USA	výzkum
12	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Modelování fyziosorpce vodíku a skleníkových plynů v	Koordinátor: Nachtigall - PřF	University of	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
			porézních materiálech/ Fysiosorption of hydrogen and greenhouse gases in porous materials. Theoretical and experimental investigation	UK řešitel ÚOCHB - Bludský	Pittsburgh, K.D. Jordan		
13	MŠMT	KONTAKT II/ KONTAKT II	Konstrukce přesných párových potenciálů z aproximativních ab initio potenciálů a přesných experimentálních dat užitím metody homotopické deformace./Constructing accurate pair potentials from their ab initio approximants and accurate experimental data using the homotopic deformation (morphing) approach.	Špirko	Krzystof Szalewicz Univ. of Delaware	USA	
14	MŠMT	KONTAKT II/ KONTAKT II	Modelování elektronicky excitovaných stavů v nukleových kyselinách: kombinovaná experimentální a teoretická studie/Modeling of Electronically Excited States in Nucleic Acids: Combined Theoretical and Experimental Study	Nachtigallová	M. de Vries, Univ. of California Santa Barbara	USA	
15	MŠMT	KONTAKT II/ KONTAKT II	Systematické mapování konformačního prostoru krátkých peptidů pomocí výpočetních metod - cesta k porozumění struktury proteinů a jejich sbalování/Systematic mapping of the conformational	Vondrášek	Valerie Daggett, University of Washington	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
			space of short peptides through molecular dynamics simulation - a way to understanding of protein structure formation				
16	MŠMT	KONTAKT II/ KONTAKT II	Biokompatibilizace a cílení nanočástic pro diagnostické a terapeutické účely/Biocompatibilization and Targeting of Nanoparticles for Diagnostic and Therapeutic Applications	Cígler	M.G. Finn, The Scripps Research institute		
17	MŠMT	KONTAKT II/ KONTAKT II	Vývoj spektroskopických metod pro zkoumání struktury biomolekul/ Development of spectroscopic methods for structural studies of biomolecules	Bouř	J. Kapitán, UP Olomouc, T. Keiderling, Univ. of Illinois, Chicago	ČR, USA	
18	MŠMT	BARRANDE	Kationtové a aniontové helicenové deriváty a jejich aplikace v koordinační chemii a molekulovém rozpoznávání	Stará	M. Meyer, Univ. de Bourgogne	Francie	
19	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	USA, Norsko	výzkum, vzdělávání

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
					of Tromsø		
20	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Syntéza selektivně funkcionalizovaných polymerů a výzkum jejich interakcí s kovy./ Synthesis of selectively functionalized polymers and investigation into their interactions with metals	Šrogl	University of N.Carolina, Raleigh	USA	výzkum
21	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Příprava nanofabrikovaných povrchů pro studium chemických a fyzikálních vlastností ukotvených molekul/The nanofabricated surfaces for studying chemical and physical properties of anchored molecules	Starý	University of Colorado, Boulder	USA	výzkum
22	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Nová antiparazitická chemoterapeutika: design, syntéza a testování/New antiparasitic chemotherapeutics: Design, synthesis and testing	Horn	University of California San Francisco	USA	výzkum
23	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Složitě architektury polyolefinů vznikající Li+ katalyzovanou polymerací/Complex Architectures of Polyolefins by Li+ catalyzed Polymerization	Michl	MPG Mainz, GAU Goettingen	Německo	výzkum
24	AV ČR	Podpora projektů	Rigidní cyklodextrinové duplexy jako divalentní spojky pro	Kraus	University of Twente,	Holandsko	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
		mezinárodní spolupráce	supramolekulární samoskladbu polymerů a organizovaných vrstev na površích/ Rigid cyclodextrin duplexes as divalent connectors for supramolecular self-assembly of polymers and organized monolayers on surfaces		Enschede		
25	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Cross-couplingová reakce organosírných látek. Oxidativní mobilizace kovového katalyzátoru./ Transition metal catalyzed cross-coupling reactions of organosulfur compounds	Šrogl	Emory University, Atlanta	USA	výzkum

b) Akce s mezinárodní účastí, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spoluorganizátor

1 Číslo	2 Název akce v češtině	3 Název akce v angličtině	4 Hlavní pořadatel akce česky/anglicky	5 Počet účastníků celkem/z toho z ciziny	6 Významná prezentace
1	Symposium chemie složek nukleových kyselin	XV Symposium on Chemistry of Nucleic Acids Components, Český Krumlov 5.-10. 6. 2011	UOCHB/Hoceck	160/120	

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
2	Chemie se setkává s biologií	Chemistry Meets Biology	ÚOCHB	40	Výročí prof. Holého
3	Konference o pokrocích v organické syntéze	Conference on Advances in Organic Synthesis	Ústav Organické chemie a Biochemie, AV ČR v.v.i. Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AS, CR, v.v.i.		Konference o pokrocích v organické syntéze
4	Konference QBIC-3	Quantum Bioinorganic Chemistry-3	ÚOCHB/Rulíšek	80/65	
5	Symposium teoretické chemie	4th JCS Symposium in Theoretical Chemistry	ÚOCHB/ÚFCH AV ČR	70/40	
6	Setkání iontová chemie, Dolní Mála Úpa	Ion Chemistry Meeting Dolní Mála Úpa	D. Schroder	23/6	6 lectures from IOCB
7	Biologicky aktivní peptidy XII, konference, Praha, Duben 27- 29, 2011	Biologically Active Peptides XII, Conference, Prague April 27- 29, 2011	J. Slaninová, V. Čeřovský UOCHB AVČR, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry Academy of Sciences of the Czech Republic	66/20	Lucifensin, a peptide behind the maggot therapy. Václav Čeřovský

c) Výčet jmen nejvýznamnějších zahraničních vědců, kteří navštívili pracoviště AV ČR

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
	Zvané přednášky			
1	Prof. Josef MICHL	Molekulární elektronika	University of Colorado at Boulder	USA
2	Prof. Marco CIPPOLONI	Acidochromní, fotochromní a fluorescenční	Università degli Studi di Perugia	Italy

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
		ethyleny		
3	Prof. Jan SVOBODA	Molekulární charakteristiky buněk	ÚMG AV ČR Praha	CZ
4	Dr. Kvido STRÍŠOVSKÝ	Regulace buněčných procesů	MRC Laboratory of Molecular Biology, Cambridge	UK
5	Prof. James STEWART	Budoucnost výpočetních semiempirických metod	Stewart Computation Chemistry	USA
6	Prof. A.M. ABD EL-ATY	Extrakční metody ve farmaceutické analýze	Cairo University, Giza	Egypt
7	Prof. Iver D. REINGOLD	Aromatické systémy s mezerami a dírami	Juniata College, Huntingdon	USA
8	Prof. Lanny S. LIEBESKIND	Kuriozní objevy v chemické syntéze	Emory University, Atlanta	USA
9	Prof. Eberhard RIEDLE	Organické solární články a fotokatalýza	Universität München	Germany
10	Prof. Mirjana ECKERT-MAKSIČ	Guanidiny od teorie k syntéze a aplikacím	Rudjer Bošković Institute, Zagreb	Croatia
11	Prof. Jacek WALUK	Tautomerismus v kondensovaných fázích	Institute of Physical Chemistry, Warsaw	Poland
12	Prof. Alex WLODAWER	XMRV protease and RNase H	National Cancer Institute, Frederick	USA
	Ostatní přednášky			
1	Prof. Charles E. McKenna	Přední odborník v oboru nukleosidové a nukleotidové chemie a chemie organofosfátů se zřetelem na nukleotidové bisfosfonáty jako účinná agens v léčbě osteonekrotických onemocnění	University of Southern California, Los Angeles	USA
2	Dr. Tomas Cihlář	Vývoj léčiv (biochemie, biologie)	Gilead Sciences, Inc.	USA
3	Dr. Richard Mackman	Vývoj léčiv (organická chemie, biochemie)	Gilead Sciences, Inc.	USA
4	Dr. Randall Halcomb	Vývoj léčiv (medicínální chemie)	Gilead Sciences, Inc.	USA
5	Dr. Mary McGrath	Vývoj léčiv (organická a strukturní chemie)	Gilead Sciences, Inc.	USA
6	Dr. Luke W. Guddat	Vývoj léčiv (biochemie, biologie)	University of Queensland, Brisbane, Australia	Australia
7	Prof. Klaus Muller-Dethlefs	Fyzikální chemie, spektroskopie	University of Manchester	UK
8	Prof. Hans Lischka	Teoretická chemie	University of Vienna	Rakousko
9	Dr. Tadeusz Pluta	Teoretická chemie	Institut Slaski-Katowice	Polsko

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
10	Dr. Wiktor Zierkiewicz	Teoretická chemie	Wroclaw University	Polsko
11	Dr. Dimitra Markovitsi	Fyzikální chemie	CEA Saclay	France
12	Dr. Aurelien de la Lande	Výpočetní chemie	Université Paris-Sud	France
13	Prof. Wolfgang Kraemer	Fyzikální chemie	MPI Garching	Germany
14	Dr. Bernd Winter	Fyzika	Helmholtz Zentrum Berlin	Germany
15	Prof. Mikael Lund	Chemie	Lund University	Sweden
16	Prof. Frank Schreiber	Fyzika	Tuebingen University	Germany
17	Prof. Jan Kubelka	Spektroskopie a fyzika peptidů	University of Wyoming	USA
18	Prof. Timothy A. Keiderling	Studie chování proteinů	University of Illinois at Chicago	USA
19	Prof. Laurence Nafie	Teorie rozptylu světla na molekulách	Syracuse University	USA
20	Dr. Gabriel Peltre	Přední světový odborník v oblasti separačních a imunochemických metod, zakladatel Francouzské elektroforetické společnosti	Ecole Supérieure de Physique et Chimie Industrielles (ESPCI), Paris	Francie
21	Prof. Milos Novotny	Přední světový odborník v oblasti separačních metod, proteomiky a glykomiky	Indiana University, Bloomington	USA
22	Prof. Takaaki Sonoda	Fyzikální organická chemie	Kyushu University	Japan
23	Prof. Jan Genzer	Chemické inženýrství	NC State University, Raleigh	USA
24	Prof. Eberhard Riedle	Experimentální fyzika	Ludwig-Maximilians-Universität München	Germany
25	Prof. Ferenc Hudecz	Prezident evropské peptidové společnosti	Hungarian Academy of Sciences at Eötvös Loránd University, Budapešť	Hungary
26	Prof. Pierre Rasmont	Biolog, autorita v oboru taxonomie včelovitého hmyzu	Université Mons	Belgium

d) Aktuální meziústavní dvoustranné dohody

1 Číslo	2 Spolupracující instituce	3 Stát	4 Oblast (téma) spolupráce
1	Gilead Sciences, Inc.	USA	Testování protivirové aktivity a vývoj léčiv
2	Rega Institute of Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven	Belgie	Testování protivirové aktivity látek
3	University of Southern California	USA	Vývoj peptidomimetických profarmak
4	University of Queensland, Brisbane	Austrálie	Testování antimalarické aktivity látek
	Max Planck Insitute for Physics of Complex Systems Dresden	SRN	Mezinárodní postgraduální škola
5	North Carolina State University, Department of Chemical and Biochemical Engineering, Raleigh	U.S.A.	Syntéza funkčních polymerních materiálů
6	Max Planck Institute for Chemical Ecology, Jena	SRN	Biosyntéza hmyzích feromonů
7	The Federal University Of Alagoas	Brazílie	Škůdci v sadech

Seznam citací

1. Khatíb, F. - Dímaio, F. - Cooper, S. - Kazmierczyk, M. - Gilski, M. - Krzywda, S. - Zábranská, H. - Pichová, I. - Thompson, J. - Popovic, Z. - Jaskolski, M. - Baker, D.: Crystal structure of a monomeric retroviral protease solved by protein folding game players. Nature Structural and Molecular Biology. Roč. 18, č. 10 (2011), s. 1175-1177.
2. Gilski, M. - Kazmierczyk, M. - Krzywda, S. - Zábranská, H. - Cooper, S. - Popovic, Z. - Khatíb, F. - Dímaio, F. - Thompson, J. - Baker, D. - Pichová, I. - Jaskolski, M.: High-resolution structure of a retroviral protease folded as a monomer. Acta Crystallographica Section D-Biological Crystallography. D67, č. 11 (2011), s. 907-914.

3. Vinterová, Z. - Šanda, M. - Dostál, J. - Hrušková, O. - Pichová, I.: Evidence for the presence of proteolytically active secreted aspartic proteinase 1 of *Candida parapsilosis* in the cell wall. *Protein Science*. Roč. 20, č. 12 (2011), s. 2004-2012.
4. Mertlíková-Kaiserová, H. - Rumlová, M. - Tloušťová, E. - Procházková, E. - Holý, A. - Votruba, I.: Point mutations in human guanylate kinase account for acquired resistance to anticancer nucleotide analogue PMEG. *Biochemical Pharmacology*. Roč. 82, č. 2 (2011), s. 131-138.
5. Bourderioux, A. - Nauš, P. - Perlíková, P. - Pohl, R. - Pichová, I. - Votruba, I. - Džubák, P. - Konečný, P. - Hajdúch, M. - Stray, K. M. - Wang, T. - Ray, A. S. - Feng, J. Y. - Birkuš, G. - Cihlar, T. - Hocek, M.: Synthesis and Significant Cytostatic Activity of 7-Hetaryl-7-deazaadenosines. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 54, č. 15 (2011), s. 5498-5507.
6. Jílková, A. - Řezáčová, P. - Lepšík, M. - Horn, M. - Váchová, J. - Fanfrlík, J. - Brynda, J. - McKerrow, J.H. - Caffrey, C.R. - Mareš, M.: Structural basis for the inhibition of the cathepsin B drug target from the human blood fluke *Schistosoma mansoni*. *Journal of Biological Chemistry*. Roč. 286, č. 41 (2011), s. 35770-81.
7. Horn, M. - Jílková, A. - Vondrášek, J. - Marešová, L. - Caffrey, C.R. - Mareš, M.: Mapping the pro-peptide of the *Schistosoma mansoni* cathepsin B1 drug target: modulation of inhibition by heparin and design of mimetic inhibitors. *ACS Chemical Biology*. Roč. 6, č. 6 (2011), s. 609-17.
8. Žebrakovská, I. - Máša, M. - Srp, J. - Horn, M. - Vávrová, K. - Mareš, M.: Complex modulation of peptidolytic activity of cathepsin D by sphingolipids. *Biochimica et Biophysica Acta - Molecular and Cell Biology of Lipids*. Roč. 1811, č. 12 (2011), s. 1097-1104.
9. Chmelař, J. - Oliveira, C.J. - Řezáčová, P. - Francischetti, I.M. - Kovářová, Z. - Pejler, G. - Kopáček, P. - Ribeiro, J.M. - Mareš, M. - Kopecký, J. - Kotsyfakis, M.: A tick salivary protein targets cathepsin G and chymase and inhibits host inflammation and platelet aggregation. *Blood*. Roč. 117, č. 2, s. 736-744 (2011).
10. Nauš, P. - Perlíková, P. - Pohl, R. - Hocek, M.: Sugar-modified derivatives of cytostatic 6-(het)aryl-7-deazapurine nucleosides: 2'-C-methylribonucleosides, arabinonucleosides and 2'-deoxy-2'-fluoroarabinonucleosides. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, 2011, Roč. 76, č. 8, s. 957-988.
11. Perlíková, P. - Pohl, R. - Votruba, I. - Shih, R. - Birkuš, G. - Cihlář, T. - Hocek, M.: Phosphoramidate pronucleotides of cytostatic 6-aryl-7-deazapurine ribonucleosides. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2011, Roč. 19, č. 1, s. 229-242.
12. Čerňová, M. - Čerňa, I. - Pohl, R. - Hocek, M.: Regioselective Direct C-H Arylations of Protected Uracils. Synthesis of 5- and 6-Aryluracil Bases. *Journal of Organic Chemistry*, 2011, Roč. 76, č. 13, s. 5309-5319.
13. Balintová, J. - Pohl, R. - Horáková, P. - Vidláková, P. - Havran, L. - Fojta, M. - Hocek, M.: Anthraquinone as a Redox Label for DNA: Synthesis, Enzymatic Incorporation, and Electrochemistry of Anthraquinone-Modified Nucleosides, Nucleotides, and DNA. *Chemistry - A European Journal*, 2011, Roč. 17, -, s. 14063-14073.
14. Macíčková-Cahová, H. - Pohl, R. - Horáková, P. - Havran, L. - Špaček, J. - Fojta, M. - Hocek, M.: Alkylsulfanyphenyl derivatives of cytosine and 7-deazaadenine nucleosides, nucleotides and nucleoside triphosphates. Synthesis, polymerase incorporation to DNA and electrochemical study. *Chemistry - A European Journal*, 2011, Roč. 17, č. 21, s. 5833-5841.
15. Hocek, M. - Fojta, M.: Nucleobase modification as redox DNA labelling for electrochemical detection. *Chemical Society Reviews*, 2011, Roč. 40, č. 12, s. 5802-5814.

16. Fojta, M. - Havran, L. - Pivoňková, H. - Horáková, P. - Hocek, M. Redox Labels and Indicators Based on Transition Metals and Organic Electroactive Moieties for Electrochemical Nucleic Acids Sensing. *Curr. Org. Chem.*, 2011, Roč. 15, - , 2936-2949.
17. Macíčková-Cahová, H. - Pohl, R. - Hocek, M.: Cleavage of Functionalized DNA Containing 5-Modified Pyrimidines by Type II Restriction Endonucleases. *Chembiochem*, 2011, Roč. 12, č. 3, s. 431-438.
18. Kielkowski, P. - Pohl, R. - Hocek, M.: Synthesis of acetylene linked double-nucleobase nucleos(t)ide building blocks and polymerase construction of DNA containing cytosines in the major groove. *Journal of Organic Chemistry*, 2011, Roč. 76, č. 9, s. 3457-3462.
19. Kielkowski, P. - Macíčková-Cahová, H. - Pohl, R. - Hocek, M.: Transient and Switchable (Triethylsilyl)ethynyl Protection of DNA against Cleavage by Restriction Endonucleases. *Angewandte Chemie. International Edition in English*, 2011, Roč. 50, č. 37, s. 8727-8730.
20. Štefko, M. - Slavětínská, L. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: General and Modular Synthesis of Isomeric 5-Substituted Pyridin-2-yl and 6-Substituted Pyridin-3-yl C-Ribonucleosides Bearing Diverse Alkyl, Aryl, Hetaryl, Amino, Carbamoyl, and Hydroxy Groups. *Journal of Organic Chemistry*, 2011, Roč. 76, č. 16, s. 6619-6635.
21. Štambaský, J. - Kapras, V. - Štefko, M. - Kysilka, O. - Hocek, M. - Malkov, A. V. - Kočovský, P.: A Modular Approach to Aryl-C-ribonucleosides via the Allylic Substitution and Ring-Closing Metathesis Sequence. A Stereocontrolled Synthesis of All Four α -/ β - and D-/L-C-Nucleoside Stereoisomers. *Journal of Organic Chemistry*, 2011, Roč. 76, č. 19, s. 7781-7803.
22. Lund, T. J. - Cavanaugh, N. A. - Joubert, N. - Urban, M. - Patro, J. N. - Hocek, M. - Kuchta, R. D.: B Family DNA Polymerases Asymmetrically Recognize Pyrimidines and Purines. *Biochemistry*, 2011, Roč. 50, č. 33, s. 7243-7250.
23. Stevens, K. - Claeys, D. D. - Catak, S. - Figaroli, S. - Hocek, M. - Tromp, J. M. - Schürch, S. - Speybroeck, V. V. - Maddar, A.: Furan-Oxidation-Triggered Inducible DNA Cross-Linking: Acyclic Versus Cyclic Furan-Containing Building Blocks-On the Benefit of Restoring the Cyclic Sugar Backbone. *Chemistry - A European Journal*, 2011, Roč. 17, č. 25, s. 6940-6953.
24. Nečas, D. - Hidasová, D. - Hocek, M. - Katora, M.: Modular synthesis of 1- α - and 1- β -(indol-2-yl)-2'-deoxyribose C-nucleosides. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 2011, Roč. 9, č. 17, s. 5934-5937.
25. Janková, Š. - Hybelbauerová, S. - Katora, M.: Synthesis of Substituted Linear Ter- and Quaterphenyls via Dewar Benzenes. *Synlett*, 2011, -, č. 3, s. 396-398.
26. Kadlčíková, A. - Vlašná, K. - Katora, M.: Enantioselective Epoxide Ring Opening Catalyzed by Bis(tetrahydroisoquinoline) N,N'-Dioxides. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, 2011, Roč. 76, č. 5, s. 415-422.
27. Tichý, T.- Andrei, G.- Dračínský, M.- Holý, A.- Balzarini, J.- Snoeck, R.- Krečmerová, M.: New prodrugs of adefovir and cidofovir. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. Roč. 19, č. 11 (2011), s. 3527-3529.
28. Topalis, D.- Lebeau, I.- Krečmerová, M.- Andrei, G.- Snoeck, R.: Activity of different classes of acyclic nucleoside phosphonates against BK virus in primary human renal cells. *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*. Roč. 55, č. 5 (2011), s. 1961-1967.
29. Mařák, D.- Otmar, M.- Votruba, I.- Dračínský, M.- Krečmerová, M.: 8-Aza-7,9-dideazaxanthine acyclic nucleoside phosphonate inhibitors of thymidine phosphorylase. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. Roč. 21, č. 2 (2011), s. 652-654.

30. Otmar, M.- Dračinský, M.- Krečmerová, M.- Balzarini, J.- Andrei, G.- Snoeck, R.: Synthesis of O² and N⁶-2-(phosphonomethoxy)ethyl derivatives of 6-phenyl and 6-pyridinyl-5-azacytosine. *Heterocycles*. Roč. 84, č. 4 (2011), s. 797-813.
31. Matoušová, M.- Votruba, I.- Otmar, M.- Tloušťová, E.- Günterová, J.- Mertlíková-Kaiserová, H.: Epigenetics. Roč. 6, č. 6 (2011), s. 769-776.
32. Jansa, P. - Baszczyński, O. - Dračinský, M. - Votruba, I. - Zídek, Z. - Bahador, G. - Stepan, G. - Cihlar, T. - Mackman, R. - Holý, A. - Janeba, Z.: A novel and efficient one-pot synthesis of symmetrical diamide (bis-amidate) prodrugs of acyclic nucleoside phosphonates and evaluation of their biological activities. *European Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 46, č. 9 (2011), s. 3748–3754.
33. Jansa, P. - Holý, A. - Dračinský, M. - Baszczyński, O. - Česnek, M. - Janeba, Z.: Efficient and 'green' microwave-assisted synthesis of haloalkylphosphonates *via* the Michaelis–Arbuzov reaction. *Green Chemistry*. Roč. 13, č. 4 (2011), s. 882–888.
34. Dejmek, M. - Hřebabecký, H. - Šála, M. - Dračinský, M. - Nencka, R.: Microwave- assisted solvent-free Diels-Alder reaction – a fast and simple route to various 5,6-substituted norbornenes and polychlorinated norbornenes. *Synthesis*. Č. 24 (2011), s. 4077-4083.
35. Šála, M. - De Palma, A. M. - Hřebabecký, H. - Dejmek, M. - Dračinský, M. - Leyssen, P. - Neyts, J. - Mertlíková-Kaiserová, H. - Nencka, R.: SAR studies of 9-norbornylpurines as Cocksackievirus B3 inhibitors. *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*. Roč. 21, č. 14 (2011), s. 4271-4275.
36. Mertlíková-Kaiserová, H. - Rumlová, M. – Tloušťová, E. – Procházková, E. - Holý, A. – Votruba, I. Molecular basis of the acquired resistance to the anticancer nucleotide analogue 9-[2-(phosphonomethoxy)ethyl]guanine (PMEG) EPFL Life Science Symposium - Hallmarks and Horizons of Cancer, Lausanne, Švýcarsko, 7.-10.9.2011, s.112.37.
37. Špak J.- Votruba I.-Pavingerová D.- Holý A.- Špaková V.- Petrzik K.: Antiviral activity of tenofovir against Cauliflower mosaic virus and its metabolism in *Brassica pekinensis*. *Antiviral Research* Roč.92(2011), s. 378-381.
38. Petrová, M. - Buděšínský, M. - Zborníková, E. - Fiedler, P. - Rosenberg, I. A Ferrier-Type Allylic Rearrangement of 3'-Deoxy-3',4'-didehydronucleosides Mediated by DMF Dimethyl Acetal: Direct Access to 4'-Alkoxy-2',3'-didehydro-2',3'-dideoxynucleosides. *Organic Letters*. Roč. 13, č. 16 (2011), s. 4200-4203.
39. Rejman, D. - Rabatinová, A. - Pombinho, A. R. - Kovačková, S. - Pohl, R. - Zborníková, E. - Kolář, M. - Bogdanová, K. - Nyč, O. - Šanderová, H. - Látal, T. - Bartůňek, P. - Krásný, L. Lipophosphonoxins: New Modular Molecular Structures with Significant Antibacterial Properties. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 54, č. 22 (2011), s. 7884-7898.
40. Páv, O. - Kóšiová, I. - Barvík, I. - Pohl, R. - Buděšínský, M. - Rosenberg, I. Synthesis of oligoribonucleotides with phosphonate-modified linkages. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 9, č. 17 (2011), s. 6120-6126.
41. Plechanovova, A.-Byun, Y.- Alquicer, G.- Skultetyova, L.-Mlcochova, P.-Nemcova, A.- Kim, H.J.-Navratil, M.-Mease, R.-Lubkowski, J.- Pomper, M.-Konvalinka, J.-Rulisek, L.-Barinka, C.: Novel Substrate-Based Inhibitors of Human Glutamate Carboxypeptidase II with Enhanced Lipophilicity. *J. Med. Chem.* 54, No. 21 (2011), pp. 7535-7546.
42. Jirásková-Vaníčková, J.- Dytrich, R.-Vorlová, B.-Hoffman, H.E.-Lepšík, M.-Jansa, P.-Konvalinka, J. Inhibition of human serine racemase, an emerging target for medicinal chemistry. *Curr Drug Targets*. 12, No. 7 (2011), pp1037-1055.

43. Fun, A., van Maarseveen, N.M.-Pokorná, J.-Maas, R.E.M.- Schipper, P.J.- Konvalinka, J.-Nijhuis, M. HIV-1 protease inhibitor mutations affect the development of HIV-1 resistance to the maturation inhibitor bevirimat. *Retrovirology* 8, art. No. 70 (2011).
44. Heyda, J.-Kožíšek, M.-Bednářová, L.-Thompson, G.-Konvalinka, J.-Vondrášek, J.-Jungwirth, P. Urea and Guanidinium Induced Denaturation of a Trp-Cage Miniprotein. *J. Phys. Chem. B.* 115, No.28, (2011), pp8910–8924.
45. Hlouchová, K.-Bařinka, C.-Konvalinka, J. Glutamate Carboxypeptidase II as therapeutic target. In „Proteinases as Drug Targets“ (Ben M. Dunn, ed.), Cambridge, RSC Publishing 2011, pp62-86. ISBN 978-1-84973-049-5.
46. Řezáčová P.-Cígler P.- Matějčík P.- Pokorná J.-Grüner B., Konvalinka, J. Medicinal Application of Carboranes: Inhibition of HIV Protease, in *Boron Science- New Technologies and Applications*, (N.S. Hosmane, ed.), CRC Press: Boca Raton, London, New York, pp. 41-70, ISBN-978-1-4398266-3-8.
47. Antolíková, E. - Žáková, L. - Turkenburg, J. P. - Watson, C. J. - Hančlová, I. - Šanda, M. - Cooper, A. - Kraus, T. - Brzozowski, A. M. - Jiráček, J.: Non-equivalent role of Inter- and intramolecular hydrogen bonds in the insulin dimer interface. *Journal of Biological Chemistry*. Roč. 286, č. 42 (2011), s. 36968-36977.
48. Maixnerová, J. - Špolcová, A. - Pýchová, M. - Blechová, M. - Elbert, T. - Řezáčová, M. - Železná, B. - Maletínská, L. Characterization of prolactin-releasing peptide: Binding, signaling and hormone secretion in rodent pituitary cell lines endogenously expressing its receptor. *Peptides*. Roč. 32, č. 4 (2011), s. 811-817.
49. Maletínská, L. - Špolcová, A. - Maixnerová, J. - Blechová, M. - Železná, B. Biological properties of prolactin-releasing peptide analogs with a modified aromatic ring of a C-terminal phenylalanine amide. *Peptides*. Roč. 32, č. 9 (2011), s. 1887-1892.
50. Maletínská, L. - Matyšková, R. - Maixnerová, J. - Sýkora, D. - Pýchová, M. - Špolcová, A. - Blechová, M. - Drápalová, J. - Lacinová, Z. - Haluzík, M. - Železná, B. The peptidic GHS-R antagonist [D-Lys3]GHRP-6 markedly improves adiposity and related metabolic abnormalities in a mouse model of postmenopausal obesity. *Molecular and Cellular Endocrinology*. Roč. 343, 1/2 (2011), s. 55-62.
51. Rambousek, L. - Bubeníková-Valešová, V. - Kačer, P. - Syslová, K. - Kenney, J. - Holubová, K. - Najmanová, V. - Zach, P. - Svoboda, J. - Stuchlík, A. - Chodounská, H. - Kapras, V. - Adamusová, E - Borovská, J. - Vyklický ml., L. - Valeš, K.: Cellular and behavioural effects of a new steroidal inhibitor of the N-methyl-d-aspartate receptor 3 α 5 β -pregnanolone glutamate. *Neuropharmacology*. Roč. 61: č 1-2 (2011), s. 61-68.
52. Vidrna, L. - Černý, I. - Pouzar, V.- Borovská, J. - Vyklický, V. - Vyklický ml., L. - Chodounská, H.: Azido analogs of neuroactive steroids. *Steroids*. Roč. 76: č 10/11 (2011), s. 1043-1050.
53. Arunan, E. - Desiraju, G.R. - Klein, R.A. - Sadlej, J. - Scheiner, S. - Alkorta, I. - Clary, D.C. - Crabtree, R.H. - Dannenberg, J.J. - Hobza, P. - Kjaergaard, H.G. - Legon, A.C. - Mennucci, B. - Nesbitt, D.J.: Definition of the hydrogen bond (IUPAC Recommendations 2011). *Pure Appl. Chem*. Roč. 83, (2011), s. 1637 - 1641.
54. Dobeš, P. - Řezáč, J. - Fanfrlík, J. - Otyepka, M. - Hobza, P.: Semiempirical Quantum Mechanical Method PM6-DH2X Describes the Geometry and Energetics of CK2-Inhibitors Compex Involving Halogen Bonds Well, While the Empirical Potential Fails. *Journal of Physical Chemistry B*: Roč. 115, (2011), s. 8581 - 8589.
55. Hobza, P.: The calculation of intermolecular interaction energies, *Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. C*, Roč. 107 (2011), s. 148-168.

56. Dempsey, C. E., Mason, P. E., Jungwirth, P. Complex Ion Effects on Polypeptide Conformational Stability: Chloride and Sulfate Salts of Guanidinium and Tetrapropylammonium. *Journal of the American Chemical Society* 2011, 133, 7300-7303.
57. Marsalek, O.; Elles, C. E.; Pieniazek, P. A.; Pluharova, E.; VandeVondele, J.; Bradforth, S. E.; Jungwirth, P.: Chasing charge localization and chemical reactivity following photoionization in liquid water. *Journal of Chemical Physics*, 2011, 135, 224510
58. Srnec, M. - Ryde, U. - Rulíšek, L.: Reductive Cleavage of the O–O Bond in Multicopper Oxidases: QM/MM and QM Study. *Faraday Discuss. Roč.* 148, - (2011), s. 41-53.
59. Gutten, O. - Beššeová, I. - Rulíšek, L.: Interaction of Metal Ions with Biomolecular Ligands: How Accurate Are Calculated Free Energies Associated with Metal Ion Complexation? *J. Phys. Chem. A, Roč.* 115, č. 41 (2011), s. 11394-11402.
60. Rokob, T. A. - Rulíšek, L. - Šrogl, J. - Révész, A. - Zins, E. L. - Schröder, D.: On the Mechanism of the Copper-Mediated C–S Bond Formation in the Intramolecular Disproportionation of Imine Disulfides. *Inorg. Chem., Roč.* 50, č. 20 (2011), s. 9968-9979.
61. Fete, M. G. - Havlas, Z. - Michl, J.: HCB(11)(CF(3))(n)F(11-n)(-): Inert Anions with High Anodic Oxidation Potentials. *Journal of the American Chemical Society. Roč.* 133, č. 11 (2011), s. 4123-4131.
62. Šebestík, J.-Bouř, P.: Raman Optical Activity of Methyloxirane Gas and Liquid. *Journal of Physical Chemistry Letters. Roč.* 2 (2011), s. 498-502.
63. Andrushchenko, V.-Tsankov, D.-Krasteva, M.-Wieser, H.-Bouř, P.: Spectroscopic Detection of DNA Quadruplexes by Vibrational Circular Dichroism. *Journal of the American Chemical Society, Roč.* 133 (2011), s. 15055-15064.
64. Pohl, R. - Dračínský, M. - Slavětínská, L. - Buděšínský, M.: The observed and calculated ¹H and ¹³C chemical shifts of tertiary amines and their N-oxides. *Magnetic Resonance in Chemistry. Roč.* 49, č. 6 (2011), s. 320-327.
65. Dračínský, M. - Pohl, R. - Slavětínská, L. - Janků, J. - Buděšínský, M.: The determination of sulfoxide configuration in six-membered rings using NMR spectroscopy and DFT calculations. *Tetrahedron Asymmetry. Roč.* 22, č. 3 (2011), s. 356-366.
66. Dračínský, M. - Pohl, R. - Slavětínská, L. - Hřebabecký, H. - Buděšínský, M.: The determination of sulfoxide configuration in five-membered rings using NMR spectroscopy and DFT calculations. *Tetrahedron Asymmetry. Roč.* 22, 18/19 (2011), s. 1797-1808.
67. Dračínský, M. - Jansa, P. - Chocholoušová, J. - Vacek, J. - Kovačková, S. - Holý, A.: Mechanism of the Isotopic Exchange Reaction of the 5-H Hydrogen of Uracil Derivatives in Water and Nonprotic Solvents. *European Journal of Organic Chemistry. -, č.* 4 (2011), s. 777-785.
68. Dračínský, M. - Jansa, P. - Ahonen, K. - Buděšínský, M.: Tautomerism and the Protonation/Deprotonation of Isocytosine in Liquid- and Solid-States Studied by NMR Spectroscopy and Theoretical Calculations. *European Journal of Organic Chemistry. -, č.* 8 (2011), s. 1544-1551.
69. Dračínský, M. - Jansa, P. - Elbert, T.: Isotope exchange reactions of the hydrogen H-5 of selected pyrimidine derivatives and the preparation of tritium-labeled pyrimidines. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications. Roč.* 76, č. 12 (2011), s. 1567-1577.
70. Dračínský, M. - Benda, L. - Bouř, P.: Ab initio modeling of fused silica, crystal quartz, and water Raman spectra. *Chemical Physics Letters. Roč.* 512, - (2011), s. 54-59.

71. Vrkoslav, V. - Háková, M. - Pecková, K. - Urbanová, K. - Cvačka, J.: Localization of Double Bonds in Wax Esters by High-Performance Liquid Chromatography/Atmospheric Pressure Chemical Ionization Mass Spectrometry Utilizing the Fragmentation of Acetonitrile-Related Adducts. *Analytical Chemistry*. Roč. 83, č. 8 (2011), s. 2978–2986.
72. Koval, D. - Severa, L. - Adriaenssens, L. - Vávra, J. - Teplý, F. - Kašička, V.: Chiral analysis of helquats by capillary electrophoresis: Resolution of helical N-heteroaromatic dications using randomly sulfated cyclodextrins. *Electrophoresis*. Roč. 32, č. 19 (2011), s. 2683-2692.
73. Ehala, S. - Toman, P. - Rathore, R. - Makrlík, E. - Kašička, V.: Affinity capillary electrophoresis and density functional theory employed for the characterization of hexaarylbenzene-based receptor complexation with alkali metal ions. *Electrophoresis*. Roč. 32, č. 9 (2011), s. 981-987.
74. Ehala, S. - Toman, P. - Makrlík, E. - Rathore, R. - Kašička, V.: Affinity capillary electrophoresis and density functional theory applied to binding constant determination and structure elucidation of hexaarylbenzene-based receptor complex with ammonium cation. *Journal of Chromatography A*. Roč. 1218, č. 30 (2011), s. 4982-4987.
75. Ehala, S. - Toman, P. - Rathore, R. - Makrlík, E. - Kašička, V.: Affinity capillary electrophoresis and quantum mechanical calculations applied to the investigation of hexaarylbenzene-based receptor binding with lithium ion. *Journal of Separation Science*. Roč. 34, č. 18 (2011), s. 2433-2440.
76. Krejčíříková, V., Páchl, P., Fábry, M., Malý, P., Rezáčová, P., Brynda, J. Structure of the mouse galectin-4 N-terminal carbohydrate-recognition domain reveals the mechanism of oligosaccharide recognition. *Acta Cryst D Sv.* 67, (2011), s. 204-211.
77. Mader, P., Brynda, J., Gitto, R., Agnello, S., Páchl, P., Supuran, C.T., Chimirri, A., Rezacova, P. Structural Basis for the Interaction Between Carbonic Anhydrase and 1,2,3,4-tetrahydroisoquinolin-2-ylsulfonamides. *J Med Chem. Sv.* 54 (2011):2522-2526.
78. Révész, A.-Schröder, D.-Rokob, T.A.-Havlik, M.-Dolenský, B. 'In-flight epimerization of a bis-Tröger base'. *Angew. Chem. Int. Ed. Sv.* 50 (2011) s. 2401.
79. Adriaenssens, L. - Severa, L. - Koval, D. - Císařová, I. - Belmonte, M. M. - Escudero-Adán, E. C. - Novotná, P. - Sázelová, P. - Vávra, J. - Pohl, R. - Šaman, D. - Urbanová, M. - Kašička, V. - Teplý, F.: [6]Saddlequat: a [6]helquat captured on its racemization pathway. *Chemical Science*. Roč. 2, č. 12 (2011), s. 2314-2320.
80. Čížková, M. – Kolivoška, V. – Císařová, I. – Šaman, D. – Pospíšil, L. - Teplý F.: Nitrogen heteroaromatic cations by [2+2+2] cycloaddition. *Organic and Biomolecular Chemistry*. Roč. 9, č. 2 (2011), s. 450-462.
81. Vávra, J. – Severa, L. – Švec, P. – Císařová, I. – Koval, D. – Sázelová, P. – Kašička, V. – Teplý, F.: Preferential Crystallization of a Helicene-Viologen Hybrid - An Efficient Method to Resolve [5]Helquat Enantiomers on a 20 g Scale. *European Journal of Organic Chemistry*. DOI: 10.1002/ejoc.201101367.
82. Teplý, F.: Photoredox catalysis by $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ to trigger transformations of organic molecules. *Organic synthesis using visible-light photocatalysis and its 20th century roots*. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Roč. 76, č. 7 (2011), s. 859-917.
83. Beier, P. - Pastýříková, T. - Vida, N. - Iakobson, G.: $\text{S}_{\text{N}}\text{Ar}$ Reactions of Nitro-(pentafluorosulfanyl)benzenes To Generate SF_5 Aryl Ethers and Sulfides. *Organic Letters*. Roč. 13, č. 6 (2011), s. 1466-1469.

84. Beier, P. - Pastýřiková, T. - Jakobson, G.: Preparation of SF₅ Aromatics by Vicarious Nucleophilic Substitution Reactions of Nitro(pentafluorosulfanyl)benzenes with Carbanions. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 76, č. 11 (2011), s. 4781-4786.
85. Beier, P. - Pastýřiková, T.: Hydroxylation of nitro-(pentafluorosulfanyl)benzenes via vicarious nucleophilic substitution of hydrogen. *Tetrahedron Letters*. Roč. 52, č. 34 (2011), s. 4392-4394.
86. Beier, P. - Opekar, S. - Zibinsky, M. - Bychinskaya, I. - Prakash, G. K. S.: A new route alpha-alkyl-alpha-fluoromethylenebisphosphonates. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 9, č. 11 (2011), s. 4035-4038.
87. Opekar, S. - Beier, P.: 1,4-Addition of tetraethyl fluoromethylenebisphosphonate to alpha, beta-unsaturated compounds. *Journal of Fluorine Chemistry*. Roč. 132, č. 5 (2011), s. 363-366.
88. Chernykh, Y. - Hlat-Glembová, K. - Klepetářová, B. - Beier, P.: Development of PhSCF₂CF₂SiMe₃ as a Tandem Anion and Radical Tetrafluoroethylene Equivalent: Preparation of Tetrafluoroethyl-Substituted Alcohols and Tetrafluorotetrahydropyrans. *European Journal of Organic Chemistry*. -, č. 24 (2011), s. 4528-4531.
89. Cherkupally, P. - Slazhnev, A. - Beier, P.: Stereoselective Synthesis of (*E*)-alpha-Fluorovinylphosphonates from alpha,alpha-Difluorophosphonates. *Synlett*. -, č. 3 (2011), s. 331-334.
90. Voltrová, S.-Hidasová, D.-Genzer, J.-Šrogl, J.: Metallothionein-inspired prototype of molecular pincer. *Chemical Communications* Roč. 47 (2011), s. 8067-8069.
91. Henke, A.-Šrogl, J.: Pd²⁺ and Cu²⁺ catalyzed oxidative cross-coupling of mercaptoacetylenes and arylboronic acids. *Chemical Communications* Roč. 47 (2011), s. 4282-4284.
92. Michl, J.- Stibor, I.: "Self Assembled Monolayer and Method of its Preparation", CZ Patent No. 302441 B6, April 8, 2011
93. Braunecker, W. A. - Akdag, A. - Boon, B. A. - Michl, J." Highly Branched Polypropylene via Li(+)-Catalyzed Radical Polymerization. *Macromolecules*. Roč. 44, č. 6 (2011), s. 1229-1232
94. Hromadová, M. - Kolivoška, V. - Gál, M. - Pospíšil, L. - Sokolová, R. - Valášek, M.: Inclusion complex of α-cyclodextrin and the extended viologen dication: a model of an insulated molecular wire. *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*. Roč. 70, 3-4 (2011), s.
95. Janata, M. - Vlček, P. - Látalová, P. - Svitáková, R. - Kaleta, J. - Valášek, M. - Volkis, V. - Michl, J." Radical polymerization of 1-alkenes catalyzed by lithium salts of carboranes. *Journal of Polymer Science. Part A - Polymer Chemistry*. Roč. 49, č. 9 (2011), s. 2018-2023.
96. Kolivoška, V. - Gál, M. - Hromadová, M. - Valášek, M. - Pospíšil, L.: Correlation of the formation constant of ferrocene-cyclodextrin complexes with dielectric properties of the aqueous DMSO solution. *Journal of Organometallic Chemistry*. Roč. 696, č. 7 (2011), s. 1404-1408
97. Kolivoška, V. - Gál, M. - Pospíšil, L. - Valášek, M. - Hromadová, M.: Electron dopable molecular wires based on the extended viologens. *Physical Chemistry Chemical Physics*. Roč. 13, č. 23 (2011), s. 11422-11429
98. Michl, J.: Towards an artificial leaf?. *Nature Chemistry*. Roč. 3, č. 4 (2011), s. 268-269
99. Volkis, V. - Douvris, C. - Michl, J. Oxidatively Induced Concurrent Cationic and Radical Polymerization of Isobutylene in the Presence of LiCB(11)Me(12). *Journal of the American Chemical Society*. Roč. 133, č. 20 (2011), s. 7801-7809

100. Sokolová, R. - Degano, I. - Ramešová, Š. - Bulíčková, J. - Hromadová, M. - Gál, M. - Fiedler, J. - Valášek, M." The oxidation mechanism of the antioxidant quercetin in non aqueous media. *Electrochimica acta*. Roč. 56, č. 21 (2011), s. 7421-7427
101. Sokolová, R. - Degano, I. - Ramešová, Š. - Bulíčková, J. - Hromadová, M. - Gál, M. - Fiedler, J. - Valášek, M.: The oxidation mechanism of the antioxidant quercetin in nonaqueous media. *Electrochimica acta*. Roč. 56, č. 21 (2011), s. 7421-7427
102. Scholz, F.- Nothofer, H-G. - Wessels, J. M.- Nelles, G. - von Wrochem, F. - Roy, S. - Chen, XD. - Michl, J. *Journal of Physical Chemistry C*. Roč. 115, č. 46 (2011), s. 22998-23007
103. Casher, D. L. - Kobr, L. - Michl, J. Electronic and Vibrational Transition Moment Directions in 7-Dimethylamino-3-methyl-N-methyl-d(3)-4-phenylethynylcarbostyryl. *Journal of Physical Chemistry A* -, Roč. 115 č. 41 (2011), s. 11167-11178
104. Mojz, V. - Buděšínský, M. - Cibulka, R. - Kraus, T.: Alloxazine-cyclodextrin conjugates for organocatalytic enantioselective sulfoxidations. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 9, č. 21 (2011), s. 7318-7326.
105. Voignier, J. - Frey, J. - Kraus, T. - Buděšínský, M. - Cvačka, J. - Heitz, V. - Sauvage, J. P.: Transition-Metal-Complexed Cyclic [3]- and [4]Pseudorotaxanes Containing Rigid Ring-and-Filament Conjugates: Synthesis and Solution Studies. *Chemistry - A European Journal*. Roč. 17, č. 19 (2011), s. 5404-5414.
106. Čerovský, V. - Slaninová, J. - Fučík, V.- Monincová, L. – Bednářová, L. – Maloň, P. – Štokrová, J.: Lucifensin, a novel insect defensin of medicinal maggots. Synthesis and structural study. *ChemBioChem*. Roč. 12, č. 9 (2011), s. 1352-1361.
107. Monincová, L. - Slaninová, J.- Fučík, V. - Hovorka, O.- Voburka, Z.- Bednářová, L.- Maloň, P. - Štokrová, J. - Čerovský, V.: Lasiocepsin, a novel cyclic antimicrobial peptide from the venom of eusocial bee *Lasioglossum laticeps* (Hymenoptera: Halictidae). *Amino Acids* Springer, v tisku DOI 10.1007/s00726-011-1125-6
108. Slaninová, J. - Putnová, L. - Borovičková, L. - Šácha, P. - Čerovský, V. - Monincová, L. - Fučík, V.: The antifungal effect of peptides from hymenoptera venom and their analogs. *Cent. Eur. J. Biol.* Roč. 6, č. 2 (2011), s. 150-159.
109. Stránský, K. - Valterová, I. - Kofroňová, E. - Urbanová, K. - Zarevúcka, M. - Wimmer, Z.: Non-Polar Lipid Components of Human Cerumen. *Lipids*. Roč. 46, č. 8 (2011), s. 781-788.
110. Kindl, J. - Kalinová, B. - Červenka, M. - Jilek, M. - Valterová, I.: Male moth songs tempt females to accept mating: The role of acoustic and pheromonal communication in reproductive behaviour of *Aphomia sociella*. *PLoS ONE*. Roč. 6, č. 10 (2011), e26476/1-e26476/8.
111. Bordereau, Ch. - Canello, E. M. - Sillam-Dusses, D. - Sémon, E.: Sex-pairing pheromones and reproductive isolation in three sympatric *Cornitermes* species (Isoptera, Termitidae, Syntermitinae). *Journal of Insect Physiology*. Roč. 57, č. 4 (2011), s. 469-474.
112. Bourguignon, T. - Šobotník, J. - Lepoint, G. - Martin, J. M. - Hardy, O. J. - Dejean, A. - Roisin, Y.: Feeding ecology and phylogenetic structure of a complex neotropical termite assemblage, revealed by nitrogen stable isotope ratios. *Ecological Entomology*. Roč. 36, č. 2 (2011), s. 261-269.
113. Lacey, M. J. - Sémon, E. - Krasulová, J. - Sillam-Dusses, D. - Robert, A. - Cornette, R. - Hoskovec, Michal. - Žáček, P. - Valterová, I. - Bordereau, Ch.: Chemical communication in termites: syn-4,6-dimethylundecan-1-ol as trail-following pheromone,

- syn-4,6-dimethylundecanal and (5E)-2,6,10-trimethylundeca-5,9-dienal as the respective male and female sex pheromones in *Hodotermopsis sjoestedti* (Isoptera, Archotermopsidae). Journal of Insect Physiology. Roč. 57, č. 12 (2011), s. 1585-1591.
114. Sillam-Dusses, D. - Hanus, R. - Abd El-Latif, A. O. - Jiroš, P. - Krasulová, J. - Kalinová, B. - Valterová, I. - Šobotník, J.: Sex Pheromone and Trail Pheromone of the Sand Termite *Psammotermes hybostoma*. Journal of Chemical Ecology. Roč. 37, č. 2 (2011), s. 179-188.
 115. Sillam-Dusses, D.: Trail Pheromones and Sex Pheromones in Termites: Glandular Origin, Chemical Nature, and Potential Use in Pest Management. Pheromones: Theories, Types and Uses. New York: NOVA Publishers, 2011 - (Gregory, I.) s. 39-92.
 116. Coppée, A. - Mathy, T. - Cammaerts, M. - Verheggen, F. J. - Terzo, M. - Iserbyt, S. - Valterová, I. - Rasmont, P.: Age-dependent attractivity of males' sexual pheromones in *Bombus terrestris* (L.) [Hymenoptera, Apidae]. Chemoecology. Roč. 21, č. 2 (2011), s. 75-82.
 117. Lecocq, T. - Lhomme, P. - Michez, D. - Dellicour, S. - Valterová, I. - Rasmont, P.: Molecular and chemical characters to evaluate species status of two cuckoo bumblebees: *Bombus barbutellus* and *Bombus maxillosus* (Hymenoptera, Apidae, Bombini). Systematic Entomology. Roč. 36, č. 3 (2011), s. 453-469.
 118. Jiroš, P. - Cvačka, J. - Hanus, R. - Kindl, J. - Kofroňová, E. - Valterová, I.: Changes in composition of triacylglycerols in the fat body of bumblebee males during their lifetime. Lipids. Roč. 46, č. 9 (2011), s. 863-871.
 119. Amatov, T. - Jahn, U.: Perhaloalkylation of Metal Enolates—Unconventional and Versatile. Angew. Chem. Int. Ed. 50, (2011), 4542-4544.
 120. Lagoutte, R. - Jahn, U.: Triphenylcarbenium Tetrafluoroborate. E-EROS. (2011), Wiley and Sons.
 121. Vibert, A. - Jahn, U.: Tris(4-bromophenyl)aminium hexachloroantimonate. E-EROS. (2011), Wiley and Sons.
 122. Uhlík, O. - Strejček, M. - Junková, P. - Šanda, M. - Hroudová, M. - Vlček, C. - Macková, M. - Macek, T.: Matrix-assisted laser desorption ionization (MALDI)-time of flight mass spectrometry- and MALDI Biotyper-based identification of cultured biophenyl-metabolizing bacteria from contaminated horseradish rhizosphere soil. Applied and Environmental Microbiology. Roč. 77, (2011), s. 6858-6866.
 123. Kurzawová, V. - Uhlík, O. - Strohalm, M. - Lipov, J. - Macek, T. - Štursa, P. - Macková, M.: Study of microorganisms degrading PCB in vegetated contaminated soil. Journal of Biochemical Technology. Roč 2, č. 5 (2011), s. 561-569.
 124. Uhlík, O. - Musilová, L. - Demnerová, K., - Macková M., - Macek T.: Stable isotope probing: Uses in metagenomics. Metagenomics: Current Innovations and Future Trends. Wymondham, UK: Caister Academic Press, 2011 - (Marco, D., Ed.) s. 87-95.
 125. Shestivska, V. - Adam, V. - Prášek, J. - Macek, T. - Macková, M. - Havel, L. - Diopan, V. - Zehnálek, J. - Hubálek, J. - Kízek, R.: Investigation of the antioxidant properties of metallothionein in transgenic tobacco plants using voltammetry at a carbon paste electrode. International Journal of Electrochemical Science. Roč. 6, (2011), s. 2869-2883
 126. Kotrba, P. - Macková, M. - Macek, T.: Transgenic approaches to improve phytoremediation of heavy metal polluted soils. Biomanagement of Metal-Contaminated Soils. Dordrecht, Heidelberg, London, New York: Springer, 2011 - (Khan, M. S.; Zaidi, A.; Goel, R.; Musarrat, J., Eds.) s. 409-438.

127. Macek, T. – Macková, M.: Potential of Biosorption Technology. Microbial Biosorption of Metals, Dordrecht, Heidelberg, London, New York: Springer, 2011 – (Kotrba, P.; Macková, M.; Macek, T.) s. 7-17.
128. Najmanová, J. – Neumannová, E. – Leonhardt, T. – Zítka, O. – Kizek, R. – Macek, T. – Macková, M. – Kotrba, P.: Cadmium-induced production of phytochelatins and speciation of intracellular cadmium in organs of *Linum usitatissimum* seedlings. Industrial Crops and Products. Roč. 36, č. 1 (2012), s. 536-542.
129. Elbert, T.: Optimization of catalyst-solvent system for preparation of alpha-5,6-dihydro-5-aza-2'-deoxy-[6-³H]-cytidine. Journal of Labelled Compounds and Radiopharmaceuticals. Roč. 54, č. 5 (2011), s. 285-285.
130. Marek, A. - Klepetářová, B. - Elbert, T.: The introduction of a double bond on the steroid skeleton - the preparation of enol silyl ether derivatives from vicinal diols. Collection of Czechoslovak Chemical Communications. Roč. 76, č. 5 (2011), s. 443-456.
131. Krausová, Z. - Sehnal, P. - Bondzic, B. P. - Chercheja, S. - Eilbracht, P. - Stará, I. G. - Šaman, D. – Starý, I.: Helicene-Based Phosphite Ligands in Asymmetric Transition-Metal Catalysis: Exploring Rh-Catalyzed Hydroformylation and Ir-Catalyzed Allylic Amination. Eur. J. Org. Chem. Č. 20-21 (2011), s. 3849–3857.
132. Rybáček, J. - Huerta-Angeles, G. - Kollárovič, A. - Stará, I. G. - Starý, I. - Rahe, P. - Nimmrich, M. – Kühnle, A.: Racemic and Optically Pure Heptahelicene-2-carboxylic Acid: Its Synthesis and Self-Assembly into Nanowire-like Aggregates. Eur. J. Org. Chem. Č. 5 (2011), s. 853–860.

Popularizační a propagační činnost

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupředatel	6 Datum a místo konání
1	Chemický jarmark	Zábavná chemie, prezentovaná formou poutňových stánků, akce se zúčastnilo více než 8000 návštěvníků nejen ze základních středních a vysokých škol ale i mateřské školky a veřejnost.	Česká hlava	23.9.2011, Praha
2	Dny otevřených dveří	Ukázky práce ústavu především pro SŠ studenty, ale i pro veřejnost. V roce 2011 ústav v rámci Dnů otevřených dveří navštívilo celkem 478 osob.	AV ČR	3.-5.10.2011, Praha
3	Hra „Oxygen“	Divadelní hra Carla Djerassiho o sporu o „objev“ kyslíku. Další představení byla uvedena 1. a 2. 10. jako jedna z akcí Dnů vědy a techniky i pro zájemce z řad veřejnosti.	AV ČR	22.6.2011, divadlo Broadway, Praha

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupořadatel	6 Datum a místo konání
4		Články a rozhovory v MFDnes, LN, MFDnes a HN a vystoupení v pořadech ČT (Konvalinka)		
5	Popularizační kniha „Viry pro 21. století“ (Academia)	Kniha popularisující výsledky české i světové vědy ve výzkumu virů (Konvalinka, Machala)		
6	Rozhovor pro ČT 24	Rozhovor při příležitosti oslav 25 let od objevu acyklických nukleosidfosfonátů profesora Antonína Holého (Krečmerová)	Česká televize	4.5. 2011
7	Věda v zahraničí	Rozhovor (Janeba)	Lidové noviny	29.3.2011
8	Rozhovor pro iDnes.cz (Kavárna)	Rozhovor na téma spolupráce s profesorem Antonínem Holým (Krečmerová, Janeba)	Redakce iDnes	29.4. 2011
9	Program TEMPUS. Vzdělávací kurs pro vyučující 3 ruských farmaceutických fakult (Moskva, Krasnodar, Sankt Peterburg)	Přednáška „Nucleoside and nucleotide analogues in antiviral and cancer therapy: new prospects in the field of acyclic nucleoside phosphonates“(Krečmerová).	VŠCHT Praha, University of Cranfield (UK)	5.10. 2011 VŠCHT Praha
10	Týden vědy a techniky	Prezentace NMR spektroskopie	AV ČR	8.11.2011
11	Vystoupení v pořadu Vstupte	Český Rozhlas Leonardo (Jungwirth)		18. 11. Praha
12	Hlavní zvaná přednáška	V. Kašička – přednesl zvanou hlavní přednášku (key note lecture) “Capillary electrophoresis with sulfated cyclodextrins chiral selectors employed for enantioresolution and helix inversion barrier determination of helquats“, na 18th International Symposium on Electro- and Liquid Phase-separation Techniques, ITP 2011, 28.8.-1.9.2011, Tbilisi, Georgia.		
13	Editování speciálního čísla časopisu	V. Kašička – editoval speciální číslo časopisu Electrophoresis, “Amino Acids, Peptides and Proteins“.		
14	ERC Workshop	Přednaska a diskuse (Schroeder)	CEITEC	Brno, 20. 9. 2011
15	Televizní Akademie	Televizní talk show o přírodních vědách (Kateřina Polívková)	ČT	1. 7. 2011 Praha

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupřadatel	6 Datum a místo konání
16	Finále FameLab	Soutěž mladých vědeckých pracovníků (Kateřina Polívková)	British Council a NFKJ	8. 5. 2011 Praha, Dejvické divadlo
17	Základní kolo FameLab	Soutěž mladých vědeckých pracovníků (Kateřina Polívková)		3. 4. 2011 Praha Malostranská Beseda
18	Milénium, ČT 24	Živé vysílání. Diskuse o antimikrobiálních peptidech jako budoucí náhrada tradičních antibiotik.		6.5.2011 Česka televize ČT 24, Kavčí hory, Praha
19	Studio Vltava, Mozaika - věda	Rozhovor o rezistenci mikrobů k současným antibiotikům a o možnostech použití antimikrobiálních peptidů v boji proti patogenním bakteriím. Antimikrobiální peptidy jako pomocníci při larvální terapii.		8.3. 2011, Český rozhlas – Vltava, Vinohradská 12, Praha
20	Článek v časopise Vesmír	Čeřovský, V.: Antimikrobiální peptidy – terapeutika budoucnosti? Vesmír Roč. 90, č. 2 (2011), s. 87-89.		
21	Článek v časopise Vesmír	Čeřovský, V.: Lucifensin, klíčová molekula larvální terapie. Vesmír Roč. 90, č. 5 (2011) s. 266-267.		

IV. Hodnocení další a jiné činnosti:

Předmětem jiné činnosti ÚOCHB je provozování nestátního zdravotnického zařízení v rozsahu vymezeném v rozhodnutí 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, purifikace a charakterizace chemických a biologických látek, testování biologické aktivity, radioaktivní značení látek, analýzy chemického a biologického materiálu a speciální měření chemických a biologických vlastností; výroba, instalace a opravy elektrických, elektronických a mechanických přístrojů a zařízení. V roce 2011 činil celkový rozsah jiné činnosti 0,34% pracovní kapacity ÚOCHB. Jiná činnost není ztrátová. Další činnost 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 2011 bylo v ÚOCHB provedeno několik externích kontrol.

1/ Audity tří projektů z rozpočtu EU.

2/ Veřejnosprávní kontrola ve smyslu zákona 320/2001 Sb., o finanční kontrole ve veřejné správě a o změně některých zákonů, ve znění pozdějších předpisů, s odkazem na ustanovení §9 zákona č. 552/1991 Sb., o státní kontrole, ve znění pozdějších předpisů, provedená ve dnech 25.11. - 25.12.2011 pracovníky kontrolní skupiny Kontrolního odboru KAV. Předmětem kontroly bylo hospodaření s prostředky státního rozpočtu. Finanční kontrola byla provedena podle ustanovení §39 zákona 218/2000 Sb., o rozpočtových pravidlech, ve znění pozdějších předpisů, §8 zákona 320/2001 Sb., o finanční kontrole ve veřejné správě a §13 zákona 130/2002 Sb., o podpoře výzkumu a vývoje.

Nápravná opatření nebyla uložena.

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

Kromě dotací od zřizovatele a prostředků od poskytovatelů grantů jsou hlavním zdrojem finančních příjmů ústavu licenční poplatky od firmy Gilead Sciences. Objem finančních zdrojů z licenčních příjmů má stoupající tendenci a tato tendence se podle vyjádření zástupců firmy Gilead očekává i v blízké budoucnosti. Finanční situaci pozitivně ovlivnilo zavedení látek tenofovir pro léčení žloutenky typu B. V různých fázích klinických testů jsou i preparáty proti papilomavirům a další preparát proti HIV. Na všechny tyto látky vlastní ústav základní patenty licencované firmě Gilead Sciences.

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

Ústav má dále smlouvu se spin-off Okapi Sciences společností v Belgii a získává tak spoluúčast za licencování patentů formou akcií neobchodovatelných na veřejných trzích. Společnost se věnuje využití protivirových látek ve veterinární medicíně. Pozitivní ekonomické výsledky se očekávají v horizontu dvou let.

Od roku 2009 funguje na ústavu dceřiná společnost IOCB TTO, s.r.o. (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry Technology Transfer Office), která vyhledává vhodné projekty pro další aplikační vývoj, pomáhá při vyřizování patentů, při vyhledávání partnerů a investorů, při licenčních jednáních, apod. Tato společnost je kontrolována dozorčí radou ve složení Mgr. Tomáš Kraus, PhD., Ing. David Šaman, CSc. a Boženou Petschovou. Výkonným ředitelem společnosti je prof. Ing. Martin Fusek, CSc. Ekonomické efekty se očekávají v oblasti medicíně chemie v horizontu do deseti let.

Ústav realizuje kompletní rekonstrukce a dostavbu areálu na Flemingově náměstí v Praze 6. To vede k modernizaci pracoviště na úroveň srovnatelnou s předními pracovišti v zahraničí. Rekonstrukce si vyžádá náklady nad 2 miliardy Kč, hrazené převážně z licenčních příjmů. První fáze rekonstrukcí, úprava budovy „C“ započala v roce 2010 a dokončena byla v roce 2011. Na dostavbu budovy „B“ a rekonstrukci budovy „A“ je vydáno pravomocné územní rozhodnutí. Předpokládané zahájení prací je květen 2012.

VII. Předpokládaný vývoj činnosti pracoviště:*)

Po rozvahovém dni nenastaly žádné skutečnosti, které by byly významné pro naplnění účelu výroční zprávy ve smyslu §21 (2) a).

Ve smyslu §21 (2) c), se nově vytvořené (počátkem roku 2007) vědecké a vědecko-servisní týmy řídí původním pracovním plánem schváleným na pětileté období, do termínu dalších evaluací v roce 2012. Předpokládaná činnost v tomto pětiletém období je tedy z velké části definována přijatým plánem.

V souladu s tézemi koncepce ÚOCHB bude předpokládaná výzkumná činnost v období 2012 – 2017 profilována následovně:

V oblasti bioorganické a medicíně chemie

– bude rozvíjen program v medicíně chemii a chemické biologii nukleových kyselin a jejich složek. Medicíně chemie bude směřována k novým typům antivirálních, antibiotických, antiparazitických a imunomodulačních acyklických i cyklických nukleosid fosfonátů (včetně jejich profarmak) a protivirových karbocyklických nukleosidů, k novým typům deazapurinových nukleosidových cytostatik a antibiotik, vývoji bis-fosfonátových inhibitorů 5'-nukleotidas a k optimalizaci epigenetických léčiv na bázi 5-azacytidinu. V programu chemické biologie budou konstruovány fosfonátové oligonukleotidy a funkcionalizované nukleové kyseliny pro bioanalytické aplikace a biokonjugace, regulace vazby proteinů na DNA a pro regulace genové exprese, methylací DNA a RNA interference.

V oblasti biochemie a molekulární biologie

- bude pokračovat vyhledávání a enzymologická charakterisace nových cílů terapeutického zásahu. Od klasických medicíně chemických postupů studia vztahu mezi strukturou a aktivitou se budeme posouvat ke složitějším biologickým modelům včetně zvířecích modelů a použití tkáňových xenograftů, funkční proteomiky a strukturní biologie při studiu molekulární podstaty lidských chorob. Zejména budou studovány proteázy účastníci se významných patologií člověka, zejména virových,

parazitárních a nádorových onemocnění a alergie, dále budou analyzovány molekulární mechanismy skládání virových částic s cílem najít nízkomolekulární inhibitory těchto dějů. Budou také připravovány analogy insulinu, či jejich kinetika, studovány interakce těchto proteinů s receptory, připravovány molekuly s oddělenými metabolickými a mitogenickými účinky, a konečně studovány peptidy regulující příjem potravy a jejich analogy.

V oblasti výpočetní chemie, spektroskopie a fyzikální organické chemie

- bude výzkum orientován na *in silico* drug design. Půjde především o vývoj nových kvantověchemických metod umožňujících přesné výpočty interakčních energií komplexu proteinů s ligandy. Po testování nové skórovací funkce se výzkum zaměří na modifikaci inhibitorů za účelem zvýšení biologické aktivity ligandů. Výzkum v teoretické bioorganické chemii bude rozšířen i do oblasti syntetické biologie, tedy k racionálnímu návrhu molekulárních struktur nesoucích funkci komplexních enzymatických systémů při současném zmenšení studovaných systémů.

Vedle toho bude pokračovat výzkum zaměřený na reakční mechanismy a meziprodukty s cílem nalézt vazby mezi chemií plynné fáze a "skutečnou" chemií v kondenzované fázi, stejně jako úspěšné studium vlivu iontů a solvatovaných elektronů na biologické procesy ve vodných roztocích s důrazem na modelování realistických *in vivo* podmínek a na vliv iontů a osmolytů na funkční procesy jako je např. enzymatická aktivita nebo přenos molekul přes buněčnou membránu.

V oblasti organické syntézy

– bude pokračovat základní výzkum nových reakcí, katalýzy a mechanismů, jakož i výzkum směřovaný k materiálovým aplikacím. V oblasti organické chemie bude pokračovat vývoj nových syntetických metod v oblasti chemie organických sloučenin fluoru, síry a křemíku, zejména nové fluoralkylační reakce a cross-coupling reakce organosírných sloučenin. Nové helikálně chirální látky (heliceny a N-heteroaromatické kationty) a modifikované cyklodextriny budou studovány jako ligandy pro enantioselektivní katalýzu a organokatalyzátory. V materiálovém výzkumu budou pokračovat studie ukotvených molekulárních rotorů, monomolekulárních vrstev organokovových sloučenin, komplexních π -elektronových systémů pro molekulární elektroniku, vyhledávání systémů pro efektivní solární články na základě procesu „singlet fission“, makromolekulárních sírných látek pro transport kovů a fluorogenních chirálních styrylových barviv.

V oblasti chemie přírodních látek

- bude rozvíjen výzkum směřovaný k medicíně a chemické ekologii. Budou studovány nové antimikrobiální peptidy účinné proti novodobým patogenním mikroorganismům. Bude rozvíjena totální syntéza a studium biologické aktivity přírodních látek (lipidy a alkaloidy) včetně vývoje metodiky jejich syntézy. U modelových druhů sociálního hmyzu (čmeláci, termiti) budou studovány chemické signály komunikace mezi kastami a regulující vývoj kolonie a studována biosyntéza těchto feromonů.

Ústav bude pečovat o převod výsledků základního výzkumu do komerční praxe prostřednictvím dceřiné společnosti IOCB TTO s.r.o.

Pokračují práce na dvou ERC Advanced grantech. Zahájení prací na těchto prestižních grantech vyžadovalo úpravu nových laboratorních prostor pro instalaci špičkových měřících 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. Aktivita v oblasti ochrany životního prostředí: *)

Výzkum na ÚOCHB se dotýká oblasti ochrany životního prostředí pouze okrajově. Na všech pracovištích ústavu se důsledně dodržuje třídění odpadu.

IX. Aktivita v oblasti pracovněprávních vztahů: *)

V roce 2011 byla hodnocena produktivita práce a kvalita vědeckých výsledků týmů i jednotlivců nezávislou komisí. Výsledky hodnocení zobrazily současný stav, byly podkladem pro další vývoj a současně poskytly měřítko pro finanční a personální podporu nejlepších týmů i pro jejich nové přístrojové vybavení.

K posílení plnění výzkumných záměrů byly zřízeny dva nové vědecko-servisní týmy v oboru virologie a medicínální chemie, které současně zajišťují i servis pro všechny vědecké týmy ústavu.

Pro zkvalitnění vědecké práce ústav přijímá na roční až dvouleté stáže výzkumníky ze zahraničí v rámci „IOCB Postdoctoral Project“. Na obsazení těchto míst je dvakrát ročně vypisován konkurz a výběr podléhá přísným kritériím na odbornost uchazečů. V roce 2011 byli do tohoto projektu přijati tři noví zaměstnanci a sedmi zaměstnancům byl na základě opětovného úspěšného absolvování konkurzu prodloužen pracovní poměr o další rok.

V neposlední řadě klade vedení ústavu důraz na vědecké vzdělávání. ÚOCHB v r. 2011 zaměstnával celkem 135 doktorandů a 84 studentů bakalářského či magisterského studia vysokých škol, jejichž školiteli - konzultanti byli vědečtí pracovníci z řad zaměstnanců ústavu.

Vědecká činnost a především publikační aktivita výzkumných pracovníků ve vědeckých a vědecko-servisních týmech je pravidelně hodnocena atestační komisí, která zasedá dvakrát ročně. Závěry hodnocení jsou podkladem pro zařazení těchto zaměstnanců do kvalifikačních stupňů a pro určení doby trvání pracovního poměru. V roce 2011 byly pracovní smlouvy výzkumných pracovníků uzavírány s ohledem na výsledky atestací na dobu určitou v trvání 1 – 5 let.

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