

Akademie věd České republiky
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, v.v.i.

Vás zve na

20. Brdičkovu přednášku

nazvanou

**"Nekovalentní interakce a jejich role
v chemii a biodisciplinách",**

kterou prosloví

Profesor Pavel Hobza

*(Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i.
Akademie věd České republiky)*

ve středu 23. června 2010 ve 14,00 hodin

**v Brdičkově posluchárně ústavu
v Praze 8, Dolejškova 3.**



"Nekovalentní interakce a jejich role v chemii a biodisciplinách"



Pavel Hobza

*Ústav organické chemie a biochemie, v.v.í.
Akademie věd České republiky*

Nekovalentní interakce hrají zásadní úlohu v přírodních vědách a jsou zodpovědné za strukturu např. vody nebo biomakromolekul. Připomeňme, že struktura biomakromolekul určuje do značné míry i funkci těchto systémů – dvoušroubovicová struktura DNA je nezbytně nutná pro uchování a hlavně přenos genetické informace. Pokusné studium nekovalentních interakcí je obtížné a nejednoznačné. Na druhé straně teoretické metody kvantové chemie v kombinaci s počítačovými experimenty (zejména metodami molekulové dynamiky) poskytují ucelený a konsistentní obraz nekovalentních interakcí v různých prostředích a různých teplotách. V přednášce budou probrány různé typy nekovalentních interakcí, jejich původ a role, kterou hrají v přírodních vědách. Dále budou zmíněny výpočetní metody od nejpřesnějších, neempirických, které poskytují energetické charakteristiky s chemickou přesností, ale jsou omezeny na systémy s max 50 atomy, až po semiempirické a empirické, které dovolují studovat systémy s několika tisíci atomy. Závěrem budou zmíněny vybrané projekty naší laboratoře, zejména počítačové návrhy nových léků.

Pavel Hobza (nar. 1946) promoval v r. 1969 na Fakultě jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT, vědeckou kandidaturu (CSc.) na téma Molekulové interakce obhájil na Ústavu fyzikální chemie ČSAV v Praze r. 1973. Po odchodu z ČSAV pracoval na Institutu hygieny a epidemiologie v Praze. Do Akademie věd se opět vrátil v 90. letech, do Ústavu fyzikální chemie J.Heyrovského, odkud v roce 2003 přešel do Ústavu organické chemie a biochemie, kde v současnosti vede oddělení Molekulového modelování a je vedoucím Centra biomolekul a komplexních molekulových systémů.

Na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy se habilitoval v roce 1992 a na téže fakultě byl v roce 2002 jmenován profesorem fyzikální chemie.

Profesor Hobza je držitelem prestižních ocenění (např. Národní cena Česká hlava za rok 2008 či Praemium Academiae, AV ČR za rok 2007), členem britské Královské společnosti chemické, Učené společnosti České republiky, Rady vlády pro výzkum, vývoj a inovace, vědeckých rad několika institucí a redakčních rad evropských a českých chemických časopisů.

Po celý svůj vědecký život se profesor Hobza zabývá kvantovou chemií a počítačovým modelováním nekovalentních vazeb, výzkumem v oblasti struktury a dynamiky molekulárních a biomolekulárních klastrů. Jeho největším vědeckým činem je objev nepravé vodíkové vazby. Dalším zásadním objevem je role patrových („stacking“) interakcí v DNA a proteinech a úloha dispersní energie v biomakromolekulách.

Publikoval více než 370 původních prací a 3 knihy. Je nejcitovanějším českým chemikem - jeho práce jsou citovány více než 15 000krát.

BRDIČKOVY PŘEDNÁŠKY

1. (1991) *Edgar HEILBRONNER (Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich)*
"The old Hückel formalism"
2. (1992) *Kamil KLIER (Lehigh University, Bethlehem, Pennsylvania)*
"Physical chemistry in two dimensions"
3. (1993) *Joshua JORTNER (Tel Aviv University, Tel Aviv)*
"Clusters – a bridge between molecular and condensed matter chemical physics"
4. (1994) *David J. SCHIFFRIN (The University of Liverpool)*
"Electrochemistry in two-dimensional systems"
5. (1995) *Josef MICHL (University of Colorado, Boulder, Colorado)*
"Molecular kit for new materials"
6. (1996) *Gerhard ERTL (Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin)*
"Self-organization in surface reactions"
7. (1997) *Roger PARSONS (University of Southampton)*
"Electrochemistry in the last 50 years: from Tafel plotting to scanning tunnelling"
8. (1998) *G. Barney ELLISON (JILA and University of Colorado, Boulder, Colorado)*
"The chemical physics of organic reactive intermediates in combustion and atmospheric processes"
9. (1999) *Henry F. SCHAEFER III (University of Georgia, Athens, Georgia)*
"The third age of quantum chemistry"
10. (2000) *Alexis T. BELL (University of California and Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, California)*
"Progress towards the molecular design of catalysts – lessons learned from experiments and theory"
11. (2001) *Mario J. MOLINA (Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts)*
"The Antarctic ozone hole"
12. (2002) *Jean-Marie LEHN (Université Louis Pasteur, Strasbourg a Collège de France, Paris)*
"Selforganization of supramolecular nanodevices"
13. (2003) *Helmut SCHWARZ (Technische Universität Berlin)*
"Elementary processes in catalysis: looking at and learning from "naked" transition ion"
14. (2004) *Rudolph A. MARCUS (California Institute of Technology, Pasadena)*
"Strange isotope effects in stratospheric ozone and in the earliest minerals in the solar system"
15. (2005) *Avelino CORMA (Instituto de Tecnología Química, Valencia)*
"Supramolecular Entities Based on Molecular Sieves for Catalysis and Synthesis of New Materials"
16. (2006) *Paul CRUTZEN (Max Planck Institute for Chemistry, Mainz):*
„Atmospheric Chemistry and Climate in the 'Anthropocene' ”.
17. (2007) *Harry B. GRAY (California Institute of Technology, Pasadena)*
"The Currents of Life: Electron Flow through Metalloproteins"
18. (2008) *Michael GRAETZEL (Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Switzerland)*
"Mesoscopic Electrodes for Generation and Storage of Electric Power from Sunlight"
19. (2009) *Gabor A. SOMORJAI (University of California, Berkeley)*
"Molecular Foundations of Heterogeneous Metal Catalysis"



Rudolf BRDIČKA
(1906-1970)

Profesor fyzikální chemie University Karlovy, řádný člen Československé akademie věd, zakladatel a ředitel Ústavu fyzikální chemie ČSAV.

Vynikající elektrochemik proslulý zejména objevnými pracemi o kinetických polarografických proudech a o aplikacích polarografie v lékařské diagnostice, skvělý učitel, autor mezinárodně známé učebnice fyzikální chemie. Významnou měrou se zasloužil o rozvoj moderní fyzikální chemie v této zemi. Navíc byl osobností vynikajících lidských vlastností.

K uctění jeho památky pořádá Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR každoročně pamětní Brdičkovu přednášku, k níž jsou zváni vynikající světoví vědci v oborech, které jsou v ústavu rozvíjeny.