

# ÚOCHB AV ČR, v. v. i.

IČ: 61388963

Sídlo: Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

## **Výroční zpráva o činnosti a hospodaření za rok 2010**

Dozorčí radou pracoviště projednána dne: 11. června 2011

Radou pracoviště schválena dne: 2. června 2011

V Praze dne 15. června 2011

## 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., 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., DrSc., Vědecká rada AV ČR**

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

**Chalupa Tomáš, Mgr., Městská část Praha 6**

**Šebek Pavel, Ing., CSc., Zentiva a.s.**

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

## **b) Změny ve složení orgánů:**

### **Rada pracoviště:**

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

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

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

### **Dozorčí rada:**

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

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

### **Ředitel:**

V průběhu roku 2010 bylo vydáno 7 vnitřních směrnic, 20 příkazů ředitele a 19 informací vedení. Vzhledem k tomu, že dlouhodobě platné příkazy byly vydány v roce 2007, v tomto roce měly příkazy charakter operativních nařízeních. Byl vydán nový Pracovní řád. Další vnitřní směrnice upravovaly systém zpracování účetnictví, stravování zaměstnanců, byl upraven vnitřní mzdový předpis a vztah s pracovníky prostřednictvím odborů (dodatky ke kolektivní smlouvě a pravidla čerpání sociálního fondu). Pravidelně se uskutečňovaly porady vedení s vedoucími vědeckých, vědecko-servisních a servisních týmů. Jako každoročně byla vyhodnocena publikační aktivita vědeckých a vědecko-servisních týmů ústavu. S výsledky hodnocení byl seznámen celý ústav. I tentokrát došlo k nárůstu produktivity týmů v počtu a kvalitě publikací a citovanosti prací z ústavu.

Na začátku roku proběhla plánovaná evaluace juniorských týmů a tří vybraných seniorských týmů. Všechny týmy předložily písemné materiály, které prošly zahraniční oponenturou a na závěr hodnocením mezinárodní evaluační komisí. Komise doporučila ukončit činnost jednoho týmu (steroidy) a neobnovovat smlouvu o společné laboratoři s VŠCHT Praha a činnost laboratoře ukončit s přechodnou dobou do konce roku 2011. Ředitel ústavu tato doporučení přijal.

Ústav připravil podklady pro evaluaci týmů v rámci hodnocení AV ČR, které se uskuteční v roce 2011.

Významným úkolem je příprava kompletní rekonstrukce a dostavby areálu. V roce 2010 proběhla rekonstrukce vily v Šultysově ulici, které bude sloužit jako ubytovací zařízení pro zahraniční hosty ústavu. Byla zahájena a dokončena rekonstrukce haly A v Papírenské ulici, která bude sloužit vývojovým dílnám ústavu, a byly rozpracovány plány rekonstrukce haly B, ve které budou umístěny laboratoře poloprovozu a dále bude sloužit pro přenos technologií a pro přípravu látek ve větším měřítku. Byla dokončena příprava a zahájena rekonstrukce budovy C (biochemie) v areálu ústavu s termínem dokončení září 2011. Do provozu bylo uvedeno nové

energocentrum. Dále pokračovaly práce na přípravě výstavby nového pavilonu B (syntetická organická chemie) a rekonstrukce hlavní budovy A. Termín zahájení je v druhé polovině roku 2011. V ústavu by upraveny a zmodernizovány některé laboratoře, hlavně sloužící práci na významných evropských projektech.

Ústav spolu s komisí pro přípravu české exhibice EXPO 2010 připravil a realizoval výstavu věnovanou antivirálním lékům prof. Holého na EXPO v Šanghaji. Ústav se rovněž zúčastnil výstavy a uspořádal na výstavišti přednášky o činnosti ústavu pro čínské specialisty.

Pokračovala činnost Výzkumného centra Gilead Sciences, podporovaného touto firmou zvláštní dotací. Vzhledem k ukončení prvního pětiletého období v roce 2011 byla dohodnuta podpora na další pětileté období a na společném zasedání se zástupci firmy Gilead Sciences byly vybrány týmy, které z této dotace budou podporovány v dalším období.

Ústav uspořádal výjezdní zasedání ústavu ve Frymburku, na kterém se prezentovaly všechny týmy. Výjezdní zasedání slouží k prohloubení vzájemného poznávání se týmů a k diskusím o vnitroustavní spolupráci.

V rámci Invited Lecture Series se uskutečnilo na ústavu 14 přednášek předních světových odborníků. Každá přednáška byla následována odbornou diskusí mezi řečníky a pracovníky ústavu. Pokračoval ústavní Postdoctoral Project, v jehož rámci pracovalo na ústavu 12 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 společnosti 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. V březnu 2010 byla ukončena činnost význačného týmu profesora Holého, který požádal o přechod mezi emeritní pracovníky ústavu. Z tohoto týmu byly dočasně ustanoveny 3 juniorské týmy v oblasti medicíně chemie a jednoho vědecko-servisního týmu v oblasti biochemie. Juniorské týmy budou podrobeny evaluacím v roce 2012.

Ústav začal jednání o transformaci vědeckého časopisu Collection of the Czechoslovak Chemical Communications na jeden z časopisů ChemXXXChem s vydavatelstvím Wiley. Důvodem jednání jsou dlouhodobé potíže se získáváním kvalitních rukopisů a stagnující úroveň časopisu. Převodem pod vydavatelství Wiley se zvýší naděje na oživení časopisu.

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

### **Rada pracoviště:**

V roce 2010 se uskutečnilo 10 jednání Rady ÚOCHB AV ČR, v. v. i. (všichni členové Rady, kteří se nezúčastnili jednotlivých zasedání, byli řádně omluveni).

### 1. zasedání - 7. 1. 2010

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

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

Dr. Havlas informoval Radu o průběhu příprav rekonstrukce budovy C a o stavu výstavby v Papírenské, Ing. Špička informoval, že stále platí předpoklad zahájení prací na budově B v listopadu letošního roku.

Dr. Havlas informoval Radu o stavu evaluačního procesu: Podklady, které vypracovali vedoucí 7 hodnocených týmů (4 juniorské + 3 seniorské), byly odeslány hodnotitelům. Po dohodě se členy AB byl stanoven termín pro hodnocení na 20.-21. března. První den proběhne prezentace vedoucích hodnocených týmů (na každý tým cca 1 hod., z toho 15 min prezentace, zbytek diskuse), druhý den společné zasedání AB a Rady ÚOCHB.

Rada vzala na vědomí informace paní Petschové o možnostech přímého nákupu zboží ze zahraničí. Vedení ústavu navrhuje v 1. etapě omezit přímé nákupy materiálových položek a menších přístrojů na země EU. Po zkušenostech z této první etapy bude okruh možných přímých nákupů rozšířen i na další důvěryhodné destinace. Přímé nákupy budou realizovány takto: ústav umožní, vždy po předchozí konzultaci s útvarem MTZ, přímé pořízení provozního materiálu ze zemí EU zaměstnancům, kteří budou mít zájem sami si zajistit celý proces vč. dopravy, pojištění, příp. reklamací a získání právoplatného daňového dokladu za příslušné zdaňovací období. Veškerou odpovědnost a rizika nese v těchto případech zaměstnanec.

### 2. zasedání - 4. 2. 2010

Přítomni: Hodačová J., Holý A., Kraus T., Moravcová J., Rulíšek L., Sychrová H.

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

Rada navrhuje vedení ústavu zajistit a) od vedoucích servisních a vědecko-servisních týmů, aby vlastní metodikou vyhodnotili poměrné využití servisního času jednotlivými vědeckými týmy za rok 2009 a b) od ekonomického oddělení, aby dodalo přehled odpovídajících provozních nákladů za toto období.

Rada uznává nezávislost Advisory Board při hodnocení týmů. Členové Rady se zúčastní prezentací jednotlivých týmů, nebudou se však účastnit evaluačního procesu.

Rada doporučuje připojit se k návrhu Fyziologického ústavu AV ČR a podpořit kandidaturu prof. Tomáše Rumla na externího člena sněmu AV ČR pro funkční období 2010-2014. Případné další kandidáty budou členové Rady navrhopvat a hodnotit hlasováním per rollam.

### 3. zasedání – 5. 3. 2010

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

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

## Metodická rada

Dr. Havlas a ing. Špička informovali Radu o průběhu rekonstrukčních prací v areálu:  
a) V současné době existuje příslib kompetentního úřadu, že stavební povolení na rekonstrukci budovy C bude vydáno 15.března t.r. V nejbližší době pak bude vyhlášen tendr a pokud proběhne bez komplikací a průtahů, bude na přelomu května a června s vítězem tendru podepsána smlouva. Vedení ústavu ujistilo Radu, že přesun osazenstva z budovy C do nových laboratoří bude do této doby zajištěn. Rada vzala na vědomí informace o stavu rekonstrukce a výstavby areálu a požádala pana Bc. Němce o vypracování detailní zprávy o stavu prací a výhledech objektu Papírenská a o její prezentaci na příštím zasedání RP.  
Rada doporučuje Metodické radě zahrnout do dopracovaného návrhu zodpovězení zejména dvou otázek: (i) Jak počítat nárokové vybavení pro stávající laboratoře a (ii) jak stanovit amortizaci přístrojů a vybavení?

### 4. zasedání – 13. 4. 2010

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

Hosté: Havlas Z., Petschová B., Pichová I., Špička J.  
Metodická rada

RP doporučuje vedení a) zajistit pozvání vedoucích Laboratoře radioisotopů (Dr. Elbert) a Vývojových dílen (Ing. Mudra) na nejbližší zasedání Rady k prezentaci detailních informací o využívání servisů a plánech pro nejbližší budoucnost a b) zajistit přípravu podkladů pro vnitřní účtování, které bude zahrnovat veškeré náklady (provoz, režie, mzdy, případně odpisy) a to ve dvou variantách – s odpisy a bez odpisů (schváleno hlasováním 6 pro, 0 proti, 1 se zdržel).

Rada pracovité diskutovala o závěrech evaluací 3 seniorských a 4 juniorských týmů v březnu t.r. a následném příkazu ředitele 7/2010. Rada se většinou hlasů (4 hlasy pro, 0 proti, 3 se zdrželi) rozhodla doporučení evaluační komise přijmout a rozhodnutí ředitele podpořit. Dále byl projednán otevřený dopis členů Společné laboratoře ÚOCHB a VŠCHT. Odpověď na tento dopis připraví během měsíce dubna předseda rady a rozešle odpověď členům RP ke schválení *per rollam*.

### 5. zasedání – 14. 5. 2010

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

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

Rada konstatuje nezbytnost existence laboratoře radioisotopů jako funkčního servisu pro ÚOCHB a doporučuje vedení najít způsob pro racionální financování týmu. Prostory předpokládané pro tento tým po rekonstrukci považuje Rada za odpovídající (schváleno aklamací jednomyslně).

Rada schvaluje výběr jedenácti významných zahraničních vědců pro zvané přednášky. Osloveni budou (příjmení bez titulů): Yonath, Pohnert, Carreira, van der Donk, Balasubramanian, Schwarz, Konin, Casadevall, Heeger, Baran a Jorgensen. Rada projednala návrh vedení na členy IAB a schválila postup rekonstrukce tohoto

poradního orgánu.

#### 6. zasedání – 4. 6. 2010

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

Hosté: Havlas Z., Mudra P., Petschová B., Pichová I.  
Metodická rada

Rada konstatuje nezbytnost existence Vývojových dílen jako funkčního servisu pro ÚOCHB a doporučuje vedení najít způsob pro racionální kalkulaci režie útvaru. Další vývoj rozsáhlejších přístrojových celků bude vyžadovat předběžné posouzení Metodickou radou ústavu.

Rada jednomyslně schvaluje návrh rozpočtu ÚOCHB na rok 2010.

RP vzala se souhlasem na vědomí návrh vedení upřesňující nákup investic.

Podrobnosti pravidel budou po schválení Radou pracoviště *per rollam* zveřejněny příkazem ředitele.

Rada a vedení osloví Advisory Board, aby se vyjádřil k návrhu RP na převedení doc. Detlefa Schrödera do prestižní kategorie „distinguished chair“ (5 hlasů pro, 0 proti, 1 se zdržel).

#### 7. zasedání – 9.7.2010

Přítomni: Hodačová J., Holý A., Konvalinka J., Kraus T., Rulíšek L., Sychrová H.

Hosté: Havlas Z., Hocek M.

Rada jednomyslně schvaluje harmonogram prací a rámcový odhad finančních nákladů spojených s výstavbou a rekonstrukcí areálu ÚOCHB.

Rada ÚOCHB jednomyslně zplnomocňuje předsedu, doc. Konvalinku, k signování společné žádosti vedení ústavu a Rady pracoviště o udělení předchozího souhlasu Dozorčí rady s a) rekonstrukcí budovy A a výstavbou nové budovy B, b) výstavbou garáží osobních automobilů v areálu ÚOCHB a c) rekonstrukcí hal v areálu Papírenská.

#### 8. zasedání – 22.10.2010

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

Hosté: Hocek M., Jungwirth P., Starý I.

Rada jednomyslně schvaluje (6 hlasů pro ze šesti přítomných členů) profilovou orientaci základního výzkumu na ÚOCHB zejména na oblasti biomedicínské chemie a chemické biologie. Rada zplnomocňuje předsedu, doc. Konvalinku, aby do 14 dnů zpracoval návrh koncepce, vč. návrhu poslání ústavu (mission), a dalších s koncepcí souvisejících aspektů (např. optimální velikost ústavu, poměr juniorských a seniorských týmů, konkurzy, evaluace a pod) a tento návrh rozeslal členům RP k připomínkovému řízení. Po zapracování podstatných připomínek a schválení RP bude finální návrh koncepce zveřejněn.

RP se zabývala úspěšnou sérií zvaných přednášek a naléhavě vyzývá vědecké

pracovníky, aby (v souladu se zápisem z 23. zasedání RP ze dne 10.10.2009) do konce roku podávali návrhy na špičkové vědce ze všech oborů, tak, aby byla zohledněna tématická různorodost pro ústav zajímavých vědních oblastí. RP se domnívá, že tento termín by měl být připomenut i na schůzi vedoucích.

Rada dále diskutovala o dalších možnostech zlepšení komunikace a meziskupinové spolupráce na ústavu. Rada doporučuje řediteli:

- a) obnovit a v pevných termínech konat schůze vedoucích skupin a
- b) organizovat pravidelné schůzky vedení ústavu s PhD studenty a zahraničními spolupracovníky.

#### 9. zasedání – 19.11.2010

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

Hosté: Havlas Z., Michl J., Němec P., Petschová B., Pichová I., Špička J.

Metodická rada

Rada požádala prof. Michla o velkou přednášku pro vědecké pracovníky ústavu na téma vědeckých záměrů a přístrojového potenciálu skupiny s cílem iniciovat zájem pracovníků o případně možné kontakty a částečné využití kapacity přístrojů v rámci ústavu. Prof. Michl žádost akceptoval. V této souvislosti Rada též doporučuje vedení provést inventarizaci všech finančně náročných či unikátních přístrojů na ústavu a jejich seznam (se stručnou charakteristikou a obrázkem) umístit na webovou stránku ústavu.

V souvislosti s projednáním zprávy nezávislého auditora, hospodářského výsledku, závěrečných úprav rozpočtu a zprávy o činnosti za rok 2009 a 31. zasedání RP, schvaluje RP aklamací (5 hlasů pro, proti 0, zdržel se 0) návrh na rozdělení hospodářského výsledku v celkové výši 666 217 499,54 Kč do fondů tak, jak vzala na vědomí Dozorčí rada, tj.: Fond rezervní (Kč 66 217 499,65) a fond reprodukce majetku (Kč 600 000 000,00).

#### 10. zasedání – 9.12.2010

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

Hosté: Havlas Z., Vondrášek J.

Dr. Vondrášek informoval 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 molekul cílených pro chemoterapii. Garantem infrastruktury na národní úrovni je MŠMT, na ÚOCHB by se mohlo jednat o vytvoření nové skupiny bioinformatiky. Rada pracoviště diskutovala o kladech i záporech případného zapojení do projektu ELIXIR, doporučuje dále sledovat vývoj projektu a požádala dr. Vondráška o průběžné informace týkající se zejména ekonomických otázek.

Radou schválené důležité dokumenty jsou součástí Vnitřních směrnic ÚOCHB AV ČR, v. v. i. Zápisy ze zasedání Rady ÚOCHB jsou přístupné na

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



### **Dozorčí rada:**

V roce 2010 se Dozorčí rada sešla celkem na 2 zasedáních. Účast členů a nejdůležitější projednávané body podává následující rekapitulace:

#### Zasedání 31. května 2010

Přítomni: Chalupa T., Rákosník J., Šaman D., Šebek P., Šebo P.

Omluveni: Illnerová H.

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

Nejdůležitější projednávané body:

DR se seznámila s Výroční zprávou o činnosti a hospodaření ÚOCHB AV ČR, v. v. i. za rok 2009 a po projednání drobných připomínek jí se souhlasem přijala.

Rada hodnotí manažerské schopnosti ředitele ve vztahu k pracovišti v roce 2009 jako dobré (2 hlasy) až vynikající (2 hlasy), poukázala však na potřebu intenzivnější komunikace s Radou pracoviště.

DR bere se souhlasem na vědomí návrh rozpočtu na rok 2010.

DR vzala na vědomí informace o rekonstrukci a přípravě stavby na ÚOCHB. DR žádá

- ředitele, aby jí předložil písemné podklady k navržené etapizaci a rámcovému rozpočtu rekonstrukce areálu ÚOCHB a stavbě nové budovy B;
- Radu pracoviště, aby jí předložila své stanovisko k této etapizaci a rámcovému rozpočtu.

DR žádá

- ředitele, aby jí předložil písemnou zprávu o průběhu a výsledcích evaluací vědecko-technických týmů ústavu provedených na jaře 2010, včetně pravidel, použitých kritérií hodnocení, stanovisek hodnotitelů a evaluovaných týmů a o opatřeních přijatých na základě výsledků těchto evaluací;
- Radu pracoviště, aby jí předložila koncepci činnosti a dalšího rozvoje ústavu (§ 18 odst. 2 písm. B) zákona č. 341/2005 Sb., o veřejných výzkumných institucích).
- DR uděluje předchozí souhlas k prodeji objektu v lokalitě Petrov jmenovitému zájemci (3 pro, 0 proti, P. Šebo se zdržel).

#### Zasedání 22. prosince 2010

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

Omluveni: --

Hosté: Havlas Z. (ředitel ÚOCHB AV ČR, v. v. i.), Konvalinka J. (předseda Rady ÚOCHB), Petschová B. (zástupkyně ředitele pro věci ekonomické), Špička J. (zástupce ředitele pro výstavbu).

Nejdůležitější projednávané body:

- DR ověřila výsledek hlasování per rollam, kterým DR vzala se souhlasem na vědomí úpravu jednacího řádu DR a udělila předchozí souhlas k

a) realizací výstavby budovy B, rekonstrukcí a opravou budovy A a výstavbě garáží v předpokládané celkové ceně 2203 mil. Kč (vč. DPH),

b) druhé etapě rekonstrukce hal (lokalita Papírenská) v předpokládané ceně 51 mil. Kč (vč. DPH),

c) prodloužení nájemní smlouvy mezi ÚOCHB jako pronajímatelem a ÚMG jako nájemcem a d) uzavření trojstranné kupní smlouvy pro nabytí pozemku v Papírenské ulici mezi ÚOCHB, Knihovnou AV ČR a paní Marcelou Horákovou za dohodnutou cenu 5,5 mil. Kč.

- DR uděluje jednomyslně aklamací předchozí souhlas k prodloužení nájemní smlouvy mezi ÚMG jako pronajímatelem a ÚOCHB jako nájemcem
- DR souhlasí s uskutečněním společného výjezdního zasedání DR ÚOCHB, Rady pracoviště a vedení ÚOCHB zaměřeného primárně na diskusi o koncepci ústavu a akceptuje návrh Dr. Havlase na místo a termín konání: Loučeň, 10.-11. června 2011. DR žádá vedení a Radu pracoviště o včasné dodání návrhu programu zasedání a materiálů ke koncepci činnosti a dalšího rozvoje ústavu
- DR vzala na vědomí informace o evaluacích z jara 2010
- DR doporučuje řediteli zajistit zpracování kontrolních propočtů nákladů na realizaci stavebních akcí (v úrovni dokumentace pro stavební povolení a dokumentace pro výběr zhotovitele) nezávislým odborníkem a žádá o předložení těchto kontrolních propočtů vždy před vyhlášením příslušného výběrového řízení.

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

## **II. Informace o změnách zřizovací listiny:**

Během roku 2010 nedošlo ke změnám zřizovací listiny

### III. Hodnocení hlavní činnosti:

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

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

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

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

Výzkum je orientován do sedmi základních oblastí:

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

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

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

**Chemie přírodních látek** – zabývá se studiem rostlinných materiálů, určuje skupiny látek, na nichž je založena obrana a komunikace hmyzu, stanovuje značkové feromony, sexuální feromony aj., s následným využitím v praxi při hubení škůdců.

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

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

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

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

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

The main research areas are listed below:

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

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

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

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

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

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

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

## 1b) výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti

Výsledky vědeckých aktivit ústavu v roce 2010 shrnuje celkem 308 publikací, z toho 295 v mezinárodních impaktovaných časopisech, 2 knihy, 12 kapitol v knihách, 11 udělených patentů, 38 plnohodnotných příspěvků na konferencích a 174 abstraktů. K nejvýznamnějším výsledkům patří:

1 Poř. č.	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
1	Vývoj metodiky C-H arylací nukleobází	3
2	Vývoj metodiky syntéz nových typů C-nukleosidů	1,2,6,13,14
3	Konstrukce DNA obsahující aldehydové funkce pro další reakce	11
4	Konstrukce DNA nesoucí steroidní substituenty	5
5	Vývoj nových deazapurinových nukleosidů jako nanomolárních cytostatik	9,10
6	Studium tautomerie purinových bází	7,8
7	Využití N-oxidů v organokatalýze	16,19,21
8	Vývoj totálních syntéz isoprenoidů a steroidů	18,22,25
9	Vývoj cross-metatézi pro syntézy biologicky aktivních látek	17,23
10	Modifikované insuliny pomáhají lépe pochopit mechanismus účinku hormonu	26
11	Náhrada estrogenu zlepšuje centrální rezistenci k leptinu u ovariektomizovaných myší na vysokotučné dietě	27
12	Syntéza strukturně různorodých typů profarmak 9-(S)-[3-hydroxy-2-(fosfonomethoxy)propyl]-2,6-diaminopurinu (HPMPDAP) a vyhodnocení jejich protivirových aktivit a farmakokinetických parametrů s konečným cílem nalézt kandidáta pro budoucí vývoj orálně aplikovatelného léčiva proti poxvirům.	28
13	Byla připravena série 6-alkylderivátů 1-(S)-[3-hydroxy-2-(fosfonomethoxy)propyl]-5-azacytosinu (HPMP-5-azaC) za účelem získání analogů antivirotika HPMP-5-azaC se stabilizovaným triazovým kruhem. Syntéza je založena na kondenzační reakci karbamoylguanidinových derivátů s orthoestery.	29
14	Ve spolupráci s University of Queensland (Austrálie) byl proveden detailní screening velké série purinových acyklických nukleosidfosfonátů na inhibiční aktivitu proti malarickému parazitu <i>Plasmodium vivax</i> a vybrány struktury pro další detailní výzkum.	30
15	Byla navržena a syntetizována nová skupina acyklických nukleosidfosfonátů obsahujících arylfosfonovou funkční skupinu. Klíčovým krokem jejich přípravy je cross-coupling reakce za podmínek mikrovlánné technologie. Pomocí <sup>31</sup> P NMR spektroskopie byly titračně stanoveny hodnoty pK <sub>a</sub> . Adeninový derivát s <i>p</i> -arylfosfonátovým motivem vykazuje mírné protivirové aktivity (VZV, HSV a HCMV).	31
16	Ve spolupráci se skupinou Dr. Luke Guddata (University of Queensland, Austrálie) byl proveden detailní screening velké série purinových acyklických nukleosidfosfonátů na inhibiční aktivitu proti parazitu <i>Plasmodium</i>	32

	vívax a byly vybrány struktury pro další výzkum.	
17	Byla vypracována metodika pro zavádění nových substituentů do polohy 6 u nukleosidových i nukleotidových derivátů obsahujících uracil jako nukleobázi. Tento postup výrazným způsobem ulehčuje přístup k těmto látkám. Tato práce byla provedena ve spolupráci se skupinou Prof. Van Calenbergha (Ghent University, Belgie).	33
18	Popsali jsme nový strukturní typ látek účinných proti Coxsackie B3 virum (čeleď Picornaviridae).	34
19	Strukturní motivy Gag polyproteinů důležité pro skládání retrovirových částic	35,36
20	The Preparation of <sup>3</sup> H-Labelled Acyclic Nucleoside Phosphonates and Study of their Stability	37
21	Jev singletového štěpení	38-42
22	Byl popsán nový způsob tvorby molekulární vrstvy na zlatě adsorpci vhodných organocíničitých solí.	43-47
23	Byla objevena nová a přívětivější syntetická cesta pro thiokyanaci B12H12(2-).	48
24	Bylo prokázáno, že RNA segment trojcestných rozhraní může hrát roli jako flexibilní strukturní prvek v RNA v ribozymu.	49
25	Byla provedena kvantově-chemická studie vlastností intermediátů v reakčním cyklu multicopper oxidáz a jejich anorganických modelů.	50
26	Mechanismus účinků derivátů PMEG	51, 52
27	Identifikace protivirové aktivity acyklických nukleosidfosfonátů proti rostlinným RNA virům (+ Biologické Centrum AVČR, České Budějovice)	53
28	Syntéza a studium vlastností alfa-cyclodextrinů reversibilně přemostěných disulfidovými vazbami	54
29	Příprava flavin-cyklodextrinových konugátů a studium jejich schopností katalyzovat enantioselektivní sulfoxidace	55
30	Nukleofilní trifluormethylace aldehydů a ketonů pomocí diethyl trifluormethylfosfonátu	56
31	Objasnění metalické atrakce a její využití pro syntézu analogů DNA	57
32	Výzkum Ramanovy optické aktivity peptidů	58,59
33	Popsání role kationtů horčíku při reaktivitě atmosférických aerosolů z mořské vody	60
34	Objasnění molekulového mechanismu fundamentálního procesu v radiační chemii – reakce solvatovaného elektronu s oxoniovým kationtem	61, 62
35	Byla zkoumána intramolekulární záměna arylových skupin mezi Pd a P v organopaladiových komplexech pomocí ESI MS	63, 64
36	Shrnutí teoretických postupů vhodných pro výpočty interakčních energií a geometrií různých typů a velikostí nekovalentních klastrů.	65
37	Byla navržena nová skórovací funkce založená na semiempirické kvantověchemické metodě PM6 – DH2	66

	vyvinuté v naší laboratoři. Celkové skóre zahrnuje enthalpický, desolvatační, deformační a entropický člen. Metoda byla úspěšně aplikována na komplexy HIV-1 proteázy s 11 ligandy.	
38	Dynamická studie neadiabatických relaxačních mechanismů excitovaných stavů bazí nukleových kyselin provedená pomocí multikonfiguračních metod ukázala na rozdílný relaxační mechanismus bazí purinového a pyrimidinového typu.	67
39	Chemical communication and defence in termites	68-70
40	Byl identifikován dlouho hledaný antimikrobiální peptid z larev mouchy <i>Lucilia sericata</i> .	71
41	Byly identifikovány dva nové antimikrobiální peptidy z jedu divoké včely <i>Halictus sexcinctus</i>	72
42	Metabolism of 15-E2-Isoprostane: The Total Synthesis of the Methyl Ester of a Potential Central Metabolite.	73
43	New Versatile Strategy towards Zinc(II)-, Copper(II)- and Cobalt(II)-Metallated Thiophene/Porphyrin-Hybrids.	74
44	A New Synthetic Approach to Thiophene-Nickel(II)porphyrin Hybrid Molecules and their Electrochemical and Computational Investigation.	75
45	$\beta,\beta$ -Disilylated Sulfones as Versatile Building Blocks in Organic Chemistry – A New Sulfonyl Carbanion Transmetalation.	76
46	A review on the correct structure assignment of phytoprostanes and on a new prostane ring system.	77
47	Jednoduchá Cu-katalyzovaná aktivace disulfidů jako klíčový krok v syntéze benzothiazolů	78
48	Nová cross-coupling reakce disulfidů a aromatických disulfidů katalyzovaná mědí a askorbáty.	79
49	Nová metoda přípravy funkcionalizovaných merkptoacetylenů	80
50	Určení trojrozměrné struktury cystatinu a serpinu ze slin klíšťat druhů <i>Ornithodoros moubata</i> a <i>Ixodes ricinus</i>	81, 82
51	Byly identifikovány aminokyselinové zbytky důležité pro aktivitu serinracemasy z lidského a myšího mozku.	83
52	Byly navrženy a syntetizovány chemické fotoreaktivní proby umožňující citlivou a specifickou detekci aktivní formy katepsinu D v proteomu nádorových buněk.	84
53	Byla rozvíjena chemie spontánních oligomerizací aktivovaných adeninových nukleosidfosfonových kyselin. V oblasti syntézy nových nukleosidů a jejich fosfonátových derivátů jsme (i) vypracovali „one pot“ metodu přípravy obtížně dostupných 3'-deoxy-3',4'-didehydronukleosid-5'-aldehydů (ii) rozvíjeli jsme syntetické postupy k získání nových piperidinových analogů nukleosidů v purinové a pyrimidinové řadě, (iii) pomocí NMR a kvantově - chemických výpočtů jsme objasnili mechanismus rozkladu různých akryoylkarbamátů na vysoce reaktivní isokyanáty a (iv) připravili jsme nový syntetický ekvivalent merkptomethylfosfonátu - S-(diisopropylfosfonomethyl)isothiuronium tosylát a prokázali jeho vynikající vlastnosti při syntéze nových látek, 5'-deoxynukleosid-5'-S-methylfosfonátů.	85-89
54	Byly objeveny nanomolární inhibitory kyslí thymidinfosforylasy (TP) izolované z T-lymfocytů SD leukémie z oblasti pyrrolidinových fosfonátových nukleotidů. Tyto látky neinhibují TP z krysích jater ani lidskou TP.	90

55	Samoskladba helicenů na pevném povrchu do podoby molekulární nanodráťů	91
56	Praktická syntéza azahelicenů	92
57	Studium dlouhých helicenů na pevném povrchu pomocí STM mikroskopie	93
58	Štěpení konfiguračně stabilního [5]helquatu na enantiomery. Analýza enantiomerního složení látky helicenového typu pomocí kapilární elektroforézy.	94
59	Vysoce modulární konstrukce kationických helikálních skeletů: rychlá syntéza strukturně rozmanitých helquatů pomocí diferenciální kvarternizace.	95
60	Charakterizace fytoimediační účinnosti rostlin vůči polybromovaným sloučeninám, genetická modifikace technologických plodin se zvýšenou expresí bakteriálních degradačních genů zodpovědných za štěpení POP a genů způsobujících zvýšenou akumulaci těžkých kovů.	96-98
61	Charakterizace vazby oxysterolových ligandů na enzymy významné pro fotosynthesu a PR-proteiny	99, 100
62	Určení stereoselektivity průběhu redukce steroidních ketonů borohydridem sodným v přítomnosti ceritých iontů	101
63	Byly syntetizovány steroidní i A-homo analogy, které inhibují GABA <sub>A</sub> receptor.	102
64	Byla připravena účinná mimetika přirozených oligosacharidových ligandů CD69 receptorů NK buněk stimulující jejich protinádorovou cytotoxickou aktivitu.	103
65	The NMR method for determination of the configuration of sulfoxide and N-oxide group based on computation-experimental approach	104, 105
66	Byla vyvinuta nová kapilárně elektroforetická metoda pro stanovení termodynamických hodnot acido-bazických disociačních (ionizačních) konstant (pK <sub>a</sub> ) sedmi velmi slabých amfoterních heterocyklických bází Lewisova typu.	106
67	Nově vyvinutou metodou kapilární afinitní elektroforézy byly kvantitativně charakterizovány nekovalentní vazebné interakce benzo-18-crown-6-etheru s ionty alkalických kovů (Li <sup>+</sup> , Na <sup>+</sup> , K <sup>+</sup> , Rb <sup>+</sup> a Cs <sup>+</sup> )	107
68	Byla nalezena metoda pro vizualizaci distribuce neutrálních lipidů na kutikule hmyzu a rostlin s využitím MALDI/TOF-MS a ionizace pomocí lithných kationtů.	108
69	Byla vypracována metoda pro analýzu komplexních směsí voskových esterů pomocí HPLC/APCI-MS a tento postup byl úspěšně aplikován na přírodní vzorky.	109

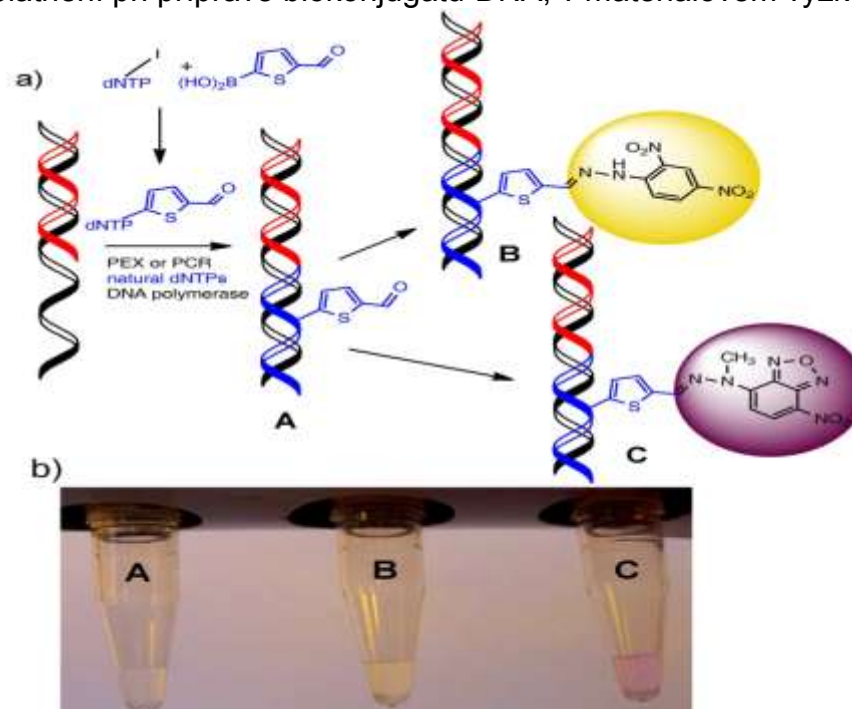
### 1c) anotace vybraných výsledků



Pořadové číslo anotace: 1

### DNA ozdobená aldehydy pro připojení dalších molekul

Byla vyvinuta nová metodika připojování různých molekul k DNA (tzv. biokonjugace). Tato metoda spočívá v syntéze DNA nesoucí velmi reaktivní aldehydové skupiny, na které lze snadno v jednom kroku připojit jiné molekuly např. pro studium molekulárního mechanismu biologických procesů nebo pro značení DNA barevnými nebo elektroaktivními značkami. Klíčovým meziproductem je DNA nesoucí velmi reaktivní aldehydové skupiny jako molekulární "věšáčky". Metoda její přípravy se skládá ze dvou stupňů. Prvním krokem je příprava modifikovaného nukleosid trifosfátu a druhým enzymatická výstavba DNA z těchto stavebních bloků katalyzovaná DNA polymerasou. Metoda by mohla najít uplatnění při přípravě biokonjugátů DNA, v materiálovém výzkumu a nanotechnologiích.

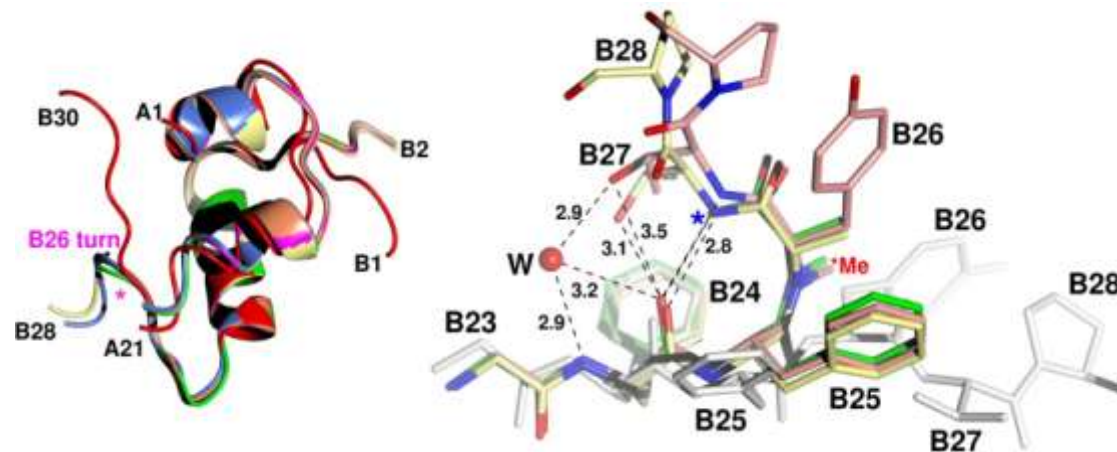


**Citace výstupu:** Raindlová, V. - Pohl, R. - Šanda, M. - Hocek, M.: Direct polymerase synthesis of reactive aldehyde-functionalized DNA and its conjugation and staining with hydrazines. *Angewandte Chemie. International Edition*. Roč. 49, č. 6 (2010), s. 1064-1066.

Pořadové číslo anotace: 2

### Modifikované insuliny pomáhají lépe pochopit mechanismus účinku hormonu

Insulin je jedním z nejdůležitějších hormonů organismu. Ztráta schopnosti produkce insulinu či neschopnost organismu insulin využít vede k onemocnění zvanému diabetes mellitus. Odhaduje se, že v roce 2009 dosáhl ve světě počet diabetiků již 245 miliónů. Působení insulinu je zprostředkováno jeho vazbou na specifický membránový receptor. Přes desítky let intenzivního výzkumu stále nebyla vyřešena struktura komplexu insulinu s receptorem. Je nicméně zřejmé, že známé 3-D struktury insulinu představují pouze zásobní a neaktivní formy hormonu. Předpokládá se, že molekula insulinu musí při interakci s receptorem podléhat rozsáhlým strukturním změnám vedoucím k vytvoření tzv. aktivní formy insulinu. Naší skupině se podařilo připravit sérii vysoce aktivních analogů insulinu modifikovaných v pozici B26. Strukturní analýza pomocí rentgenové krystalografie vyjevila, že tyto analogy mají unikátní struktury u insulinu doposud nepozorované. Hlavním znakem těchto struktur je  $\alpha$ -ohyb C-konce B-řetězce („B26 turn“ na obrázku vlevo) doprovázený trans-cis izomerií peptidové vazby B25-B26 (detail na obrázku vpravo). Tento ohyb má za důsledek odkrytí jiné části insulinu nezbytné pro vazbu na receptor. Oprávněně se domníváme, že struktury těchto analogů mohou být velmi podobné aktivní formě insulinu. Naše výsledky představují průlom ve studiu interakce insulinu s receptorem. Modifikované insuliny napodobující aktivní formu hormonu mohou být výchozím bodem pro přípravu dalších analogů insulinu či jeho mimetik, které by mohly najít uplatnění při nasální, pulmonální či orální aplikaci při léčení diabetu.

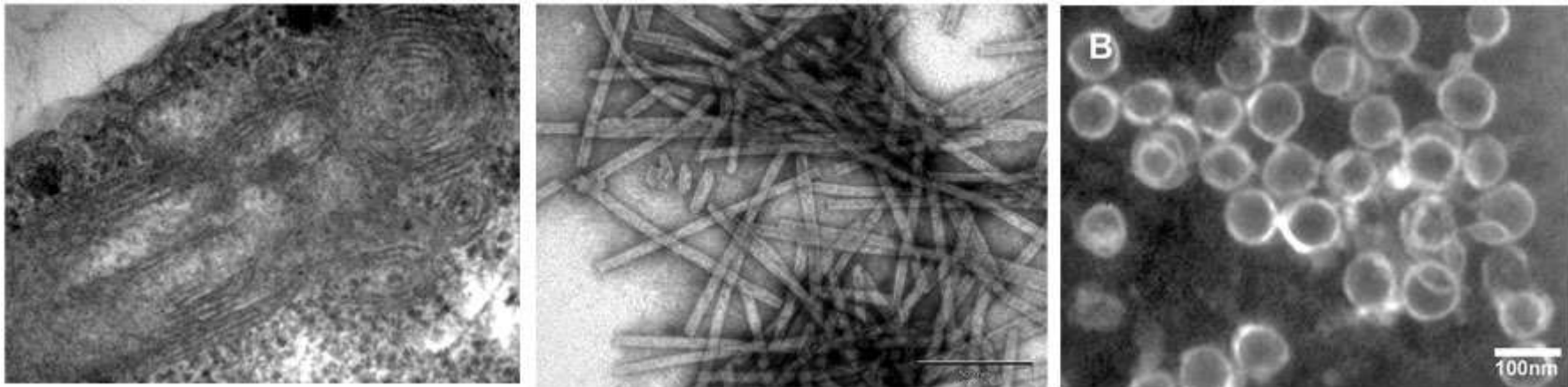


Citace výstupu: Jiráček, J. - Žáková, L. - Antolíková, E. - Watson, C. J. - Turkenburg, J. P. - Dodson, G. G. - Brzozowski, A. M.: Implications for the active form of human insulin based on the structural convergence of highly active hormone analogues. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. Roč. 107, č. 5 (2010), s. 1966-1970.

Pořadové číslo anotace: 3

### Strukturní motivy Gag polyproteinů důležité pro skládání retrovirových částic

Skládání nové virové částice v hostitelských buňkách představuje důležitý krok v životním cyklu retrovirů. Nově syntetizované prekursory virových proteinů (tzv. Gag polyproteinů) jsou v buňce transportovány k místu skládání, kde společně s virovou RNA začínají tvořit nezralou virovou částici. Detailní znalost strukturních motivů Gag polyproteinů, které hrají klíčovou roli v procesu skládání, je důležitá jak pro pochopení tohoto komplexního procesu, tak pro vývoj specifických inhibitorů, které blokují buď vzájemné interakce virových strukturních proteinů, nebo interakce proteinů s virovou RNA. Při studiu skládání částic opičího Mason Pfizerova viru (Mason-Pfizer monkey virus, M-PMV) a viru myšího tumoru prsní žlázy (Mouse mammary tumor virus, MMTV) se nám podařilo pomocí in vitro i in vivo experimentů a analýz divokého typu virů a série jejich mutantů identifikovat strukturní motivy Gag polyproteinů, které jsou kritické pro tvorbu nezralých retrovirových částic. Tyto domény nebyly doposud popsány a přinášejí důležité poznatky pro pochopení procesu skládání. Pro testování inhibitorů skládání jsme vyvinuli unikátní metodu, založenou na měření inhibice interakce virového strukturního proteinu se značeným oligonukleotidem, která je použitelná pro testování ve velkém měřítku. Metoda byla patentována.



Citace výstupu: Rumlová, M., Ruml, T., Hadravová, R., Pichová, I. Method of testing of inhibitors of assembly using labeled oligonucleotides or nucleic acids. PV 2010-718

**1d) domáci a zahraniční ocenění zaměstnanců pracoviště**

<b>1 Číslo</b>	<b>2 Jméno oceněného</b>	<b>3 Druh a název ocenění</b>	<b>4 Oceněná činnost</b>	<b>5 Ocenění udělil</b>
1	Josef Michl	ACS Fellow	Excellence in ACS service	ACS
2	Pavel Jungwirth	Praemium Academie		AV ČR
3	Michal Hocek	Jmenování do Editorial Advisory Board časopisu ChemBioChem		
4	Detlef Schröder	Jmenování do Editorial Board časopisu International Journal of Mass Spectrometry (od 1.1.2011 Editor-in-Chief)		
5	Jiří Šrogl	Graduate Faculty	Vědecká a pedagogická činnost	Department of Molecular and Biomolecular Engineering, North Carolina State University
6	Václav Kašička	Invited plenary lecture	28th International Symposium on Chromatography, ISC 2010, 12-16.9.2010, Valencia, Spain.	
7	Václav Kašička	Guest Editor	Journal of Separation Science „Analysis of amino acids and peptides“.	
8	Petr Jansa	Best Oral Presentation	Přednáška – 10th Conference of Young Scientists	Sigma-Aldrich CZ
9	Petr Jansa	Invited speaker	Přednáška „Acyclic nucleoside phosphonates: New type of antiviral drugs.“	Prague Hepatology Meeting 2010
10	Martin Srnec	SCOPUS 2009 Award	4 <sup>th</sup> place in the best paper	SCOPUS

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
			published in by Ph.D. Students in the Czech Rep.	
11	Michal Straka	Ceny Vladimira Hanuse a Petra Sedmery	Molekulární struktura látek	Spektroskopická společnost Jana Marka Marci
12	Petr Žáček	Student Award from the Internation Society of Chemical Ecology	Presentace na 26th Annual Meeting of the ISCE	Internation Society of Chemical Ecology
13	Filip Teplý a spoluautorský kolektiv	Cena Miloše Hudlického za rok 2009	Za práci: Helquats: A Facile, Modular, Scalable Route to Novel Helical Dications ( <i>Chem. Eur. J.</i> <b>2009</b> , 1072-1076)	Česká společnost chemická, udělení ceny 18.1.2011
14	Lukáš Severa	1. místo na studentské vědecké konferenci VŠCHT Praha, 19.11. 2010	Saddlequat: DFT výpočet a realita	VŠCHT-Praha, Komise odborníků
15	Ondřej Uhlík	Cena ministra školství ČR	Disertační práce a publikace	MŠMT

#### 1e) další specifické informace o pracovišti

Týmy Dr. Krečmerové, Dr. Janeby, Dr. Nencky zahájily svou samostatnou činnost v březnu 2010 jako juniorské výzkumné týmy vzniklé po rozdělení původní skupiny prof. A. Holého. Vědecko servisní tým Dr. Mertlíkové-Kaiserové vznikl ke stejnému datu ze stejného důvodu. Původní skupina prof. A. Holého ukončila svou činnost k 1.3. 2010, prof. Holý má od tohoto data status emeritního pracovníka ÚOCHB.

Ve dnech 20. – 21. 3. 2010 proběhly vnitřní evaluace juniorských a tří vybraných seniorských týmů. Všechny juniorské týmy uspěly a budou pokračovat. Ze tří seniorských týmů uspěl jeden. Zbylé dva (Macek, Chodounská) musí ukončit svou činnost do konce roku 2011.

V roce 2010 byla zahájena a ukončena výstavba ubytovacího zařízení pro zahraniční návštěvníky v Břevnově a výstavba haly A v ulici Papírenská, která bude sloužit vývojovým dílnám ÚOCHB. Zároveň byla zahájena rekonstrukce budovy C (Biochemie) a získáno územní povolení pro výstavbu budovy B a rekonstrukci budovy A.

V roce 2010 byly v Laboratoři radioisotopů připraveny následující sloučeniny značené radionuklidy pro potřeby výzkumných týmů z ÚOCHB:

#### I. Peptidy značené radionuklidem $^{125}\text{I}$ :

[ $^{125}\text{I}$ ]PrRP-31 rat	2 šarže, celková aktivita 0,75 mCi	pro tým Dr. Maletínské
[ $^{125}\text{I}$ ]CART(61-102)	1 šarže, celková aktivita 0,33 mCi	pro tým Dr. Maletínské
[ $^{125}\text{I}$ ]DAPA-3-Ghrelin	2 šarže, celková aktivita 1,95 mCi	pro tým Dr. Maletínské

#### II. Analoga nukleotidů značené radionuklidem $^3\text{H}$ :

9-(2-phosphonomethoxyethyl)-2,6-diamino[8- $^3\text{H}$ ]purine (4,25 mCi),  $\alpha$ -5-aza -5,6-dihydro- 2'-deoxy-[6- $^3\text{H}$ ]cytidin (14,8 mCi), 9-[(1R\*, 2R\*, 4S\*)-[5endo,6endo- $^3\text{H}$ ]bicyklo[2.2.1.]hept-2yl]-6-chloro- 9H-purin (150 mCi) a [U- $^{14}\text{C}$ ]GMP (8,4  $\mu\text{Ci}$ ) pro tým Dr.Kaiserové Mertlíkové.

V rámci v roce 2009 založené mezinárodní spin-off firmy (Mendel Therapeutic Ltd.), jejímž cílem je akcelarovat přenos výsledků dosažených v oblasti základního výzkumu nepyrogenních imunoterapeutik normuramylového typu do klinické praxe, byly navázány kontakty s farmaceutickými firmami, v některých případech byla navázána přímá spolupráce v oblasti testování vzorků. Dále byla vedena jednání s potenciálními investory, jejichž investice by umožnila dovést vývoj látek do pilotního klinického experimentu a zvýšila tak ekonomickou hodnotu licencovaného duševního vlastnictví.

Spin-off firma Okapi Sciences (spoluvlastněná s belgickými partnery) uvádí po ročním působení na trh první preparát veterinárního léku proti FLV.

## 2. Vzdělávací činnost

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

1 Číslo	2 Bakalářský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Organická chemie	PřF UK v Praze	Ano				
2	Fyziologie živočichů	PřF UK v Praze			Ano		
3	Biochemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		Lab. kursy
4	Chemie v přírodních vědách	PřF UK v Praze		Ano	Ano		
5	Biologie	PřF UK v Praze			Ano		
6	Klinická a toxikologická analýza	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
7	Biochemie	VŠCHT Praha			Ano		
8	Biochemie a biotechnologie	VŠCHT Praha			Ano		
1	Organická chemie	PřF UK v Praze	Ano				
2	Fyziologie živočichů	PřF UK v Praze			Ano		

1 Číslo	2 Magisterský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Biochemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
2	Organická syntéza III	PřF UK v Praze	Ano				
3	Seminář z organické chemie	PřF UK v Praze		Ano			
4	Kursy NMR 1 NMR 2	PřF UK v Praze	Ano	Ano			
5	Klinická a toxikologická analýza	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
6	Fyziologie živočichů	PřF UK v Praze			Ano		

1 Číslo	2 Magisterský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
7	Buněčná biologie	PřF UK v Praze			Ano		
8	Biofyzikální chemie	PřF UK v Praze			Ano		
9	Chemie životního prostředí	PřF UK v Praze			Ano		
10	Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur	PřF UK v Praze	Ano	Ano	Ano	Ano	Organi- zace obhajob
11	Analytická chemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
12	Zoologie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
13	Biozika	MFF UK v Praze	Ano	Ano	Ano	Ano	
14	Všeobecné lékařství	1. LF UK v Praze	Ano		Ano		
15	Bioorganická chemie	VŠCHT Praha	Ano				
16	Chemie	VŠCHT Praha			Ano		
17	Organická chemie	VŠCHT Praha			Ano		Erasmus
18	Biochemie	VŠCHT Praha	Ano				
19	Syntéza a výroba léčiv	VŠCHT Praha			Ano		
20	Chemie přírodních látek	VŠCHT Praha	Ano				
21	Bioorganická chemie	LF UP Olomouc	Ano				
22	Ochrana lesa	ČZU v Praze	Ano				
23	Fyziologie živočichů	JČU, Č. Budějovice	Ano				

1 Číslo	2 Doktorský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Biochemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
2	Organická chemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		
3	Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur	PřF UK v Praze	Ano	Ano	Ano	Ano	Organi- zace obhajob
4	Analytická chemie	PřF UK v Praze	Ano		Ano		



1 Číslo	2 Doktorský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
5	Zoologie	PřF UK v Praze			Ano		
6	Biochemie a patobiochemie	1.LF UK v Praze			Ano		
7	Fyzika	MFF UK v Praze	Ano	Ano	Ano	Ano	
8	Biochemie	VŠCHT Praha			Ano		
9	Chemie – organická chemie	VŠCHT Praha			Ano		
10	Mikrobiologie	VŠCHT Praha			Ano		
11	Organická chemie	VŠCHT Praha			Ano		
12	Chemie	VŠCHT Praha	Ano	Ano	Ano	Ano	
13	Analytická chemie	VŠCHT Praha			Ano		
14	Chemie – organická chemie	MU Brno			Ano		
15	Organic Chemistry	TU Braunschweig (Německo)			Ano		

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

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel/škola	4 Činnost
1	Výuka chemie	Střední odborná škola stavební a obchodní akademie Kladno	Výuka chemie (Blažek)
2	100 let od zahájení výuky chemie na gymnáziu v Klatovech	Gymnázium J. Vrchlického v Klatovech	Přednáška - Vývoj protivirových a protinádorových léčiv na principu antimetabolitů (Hájek)
3	Letní odborné soustředění pro účastníky Chemické a Biologické olympiády, Běstvína	MŠMT, VŠCHT- Praha	Série přednášek o základech organické chemie (lektor F. Teplý, 5.-7.7.2010)
4	Výuka chemie	Masarykova střední chemická škola, Praha	Vedení studentských vědeckých prací (R. Pohl)

## 2c) vzdělávání veřejnosti

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel	4 Činnost
1	Podzimní škola	ČBMB	Přednášky v rámci vzdělávacího cyklu pro středoškolské učitele
2	Monthly news distribution in Organic Chemistry in „Nachrichten aus der Chemie“	German Chemical Society	Selection of most important News from current organic chemistry literature, preparation of generally understandable text and its publication.
3	Quarterly news distribution in Organic Chemistry in „Chemické Listy“	Czech Chemical Society	Selection of most important News from current organic chemistry literature, preparation of generally understandable text and its publication.
4	Praktické kurzy z chemie: Nové Hradky	AV ČR, UK	Přednáška
5	Přednáška Steroidy	PřF UJEP, Ústí n.L.	Přednáška v rámci odborného semináře pořádaného katedrou chemie

## 3. Činnost pro praxi

### 3a-1) výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů

Pořadové číslo: 1

Dosažený výsledek: Zahájení spolupráce se Zentivou, k.s.

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: Příprava geneticky modifikovaných rostlin pro bioremediace

Uplatnění/Citace výstupu: Genetická modifikace technologických plodin se zvýšenou expresí bakteriálních degradačních genů zodpovědných za štěpení POP a genů způsobujících zvýšenou akumulaci těžkých kovů

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

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

Poskytovatel: MŠMT

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

Pořadové číslo: 3

Dosažený výsledek: Charakterizace fytořediační účinnosti rostlin vůči polybromovaným sloučeninám

Uplatnění/Citace výstupu: biologické čištění kontaminovaných půd

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

Název projektu/programu v angličtině: National Research Project II, Bioremediation of Soils and Sediments Contaminated by Polyhalogenated Aromatic Compounds.

Poskytovatel: MŠMT

Partnerská organizace: ENVISAN GEM, a.s., VIDIA s.r.o., ÚMG AV ČR, VŠCHT Praha

Pořadové číslo: 4

Název projektu /programu v češtině: Použití ultrazvuku v nanomedicíně

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

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

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

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

Uplatnění/Citace výstupu: 103

Pořadové číslo: 5

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

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

Poskytovatel: Agentura Akademie věd ČR v rámci programu „Nanobiologie a nanomedicína“ ( KAN200100801)

Partnerská organizace: Zentiva a.s. Praha

Dosažený výsledek: Chemická modifikace povrchu nanodiamantů

Uplatnění/Citace výstupu: Předběžné výsledky

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

1 Číslo	2 Zadavatel	3 Výsledek (anotace)	4 Uplatnění
---			

**Celkový počet získaných výsledků**

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

1 Číslo	2 Název firmy	3 Důvod založení	4 Kategorie firmy	5 Činnost firmy
1	Okapi Sciences	Komericializace výsledků základního výzkumu v oblasti veterinárních léčiv	Mezinárodní spin-off firma se sídlem v Belgii	Příprava a vývoj antivirálních veterinárních léčiv pro léčbu hospodářských i domácích zvířat.

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

Pořadové číslo: 1

Název česky: Deriváty kyseliny glukosaminylmuramové

Název anglicky: Glucosaminyl muramic acid derivatives

Kategorie: český patent z oboru organické chemie

Zapsán pod číslem: CZ301451

Popis česky: Deriváty kyseliny glukosaminylmuramové (kyseliny 2-amino-2-deoxy- $\beta$ -D-glukopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 4)-*N*-acetylmuramové) a způsob jejich přípravy a využití při syntéze glukosaminylmuramových glykopeptidů, tj. disacharidových analogů muramových glykopeptidů.

Popis anglicky: Glucosaminyl muramic acid (2-amino-2-deoxy- $\beta$ -D-glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 4)-*N*-acetylmuramic acid ) derivatives, method of their synthesis and their use for the synthesis of glucosaminylmuramyl glycopeptides, ie. disaccharide analogues of muramyl glycopeptides

Využití: V základním výzkumu, farmaceutickém průmyslu, v humánním i veterinárním lékařství

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Mir. Ledvina, 731447863, Miroslav.Ledvina@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 2

Název česky: Prostředek pro kontrolu motýla zavíječe *Euzophera batangensis* a jeho použití

Název anglicky: *Eusophera batangensis* pyralid moth control composition and use thereof

Kategorie: český patent z oboru chemie přírodních látek

Zapsán pod číslem: CZ301579

Popis česky: prostředek pro kontrolu populace motýla zavíječe *Euzophera batangensis* (Lepidoptera: Pyralidae), obsahující (9Z,12E)-tetradeka-9,12-dien-1-ol vzorce I, případně v kombinaci s (9Z)-tetradec-9-en-1-olem vzorce II, v oblasti integrované ochrany ovocného stromu cicimku jujuba (*Ziziphus jujuba*).

Popis anglicky: A composition for controlling population of *Eusophera batangensis* pyralid moth (Lepidoptera: Pyralidae) containing (9Z,12E)-tetradeca-9,12-dien-1-ol of the general formula I, optionally in combination with (9Z)-tetradec-9-en-1-ole of the general formula II, in the field of integrated protection of *Ziziphus jujuba* fruit tree.

Využití: Feromonová past pro integrovanou ochranu ovocných stromů

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Michal Hoskovec, 220183240, Michal.Hoskovec@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 3

Název česky: Alfa-cyklodextrinový dimer, způsob jeho přípravy a jeho použití

Název anglicky: Alpha-cyclodextrin dimer, process of its preparation and its usage

Kategorie: český patent z oboru organické chemie

Zapsán pod číslem: CZ301772

Popis česky: Řešení se týká alfa-cyklodextrinového dimeru spojeného disulfidovými vazbami v polohách C6<sup>I</sup>-C6<sup>I'</sup> a C6<sup>IV</sup>-C6<sup>IV'</sup>, způsobu jeho přípravy a jeho využití pro komplexace organických molekul a jejich opětovné uvolnění působením redukujících thiolů. Tento dimer může být zvláště užitečný pro cílenou dopravu léčiv s vhodnou strukturou.

Popis anglicky: The present invention relates to an alpha-cyclodextrin dimer coupled by disulfide bonds in positions C6<sup>I</sup>-C6<sup>I'</sup> and C6<sup>IV</sup>-C6<sup>IV'</sup>, further to process for its preparation and its use for completing organic molecules and their re-detachment by the action of reducing thiols. This dimer can be particularly useful for targeted transport of medicaments with suitable structure.

Využití: Farmaceuticky pro cílenou dopravu léčiv s vhodnou strukturou.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Tomáš Kraus, 220183372, Tomas.Kraus@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 4

Název česky: Peptidy, způsob jejich přípravy a jejich použití

Název anglicky: Peptides, process of their preparation and their use

Kategorie: český patent z oblasti chemie přírodních látek

Zapsán pod číslem: CZ301654

Popis česky: Řešení se týká nových peptidů izolovaných z jedových váčků samotářských včel Lasioglossum laticeps způsobů jejich přípravy a jejich použití pro výrobu léčiva pro léčení mikrobiálních, virových a plísňových onemocnění a pro léčení rakovin.

Popis anglicky: The present invention relates to novel peptides isolated from poison sac of solitary bees Lasioglossum laticeps and a process of preparing the above-indicated novel peptides as well as their uses for the preparation of a medicament intended for treating microbial, viral and fungal diseases and for treating various kinds of cancer.

Využití: pro výrobu léčiva pro léčení mikrobiálních, virových a plísňových onemocnění a pro léčení rakovin.

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

Pořadové číslo: 5

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

Název anglicky: Ligands of  $\alpha$ - and  $\beta$ - estrogen receptors and processes of their preparation and use

Kategorie: český patent - bioorganická a medicínální chemie

Zapsán pod číslem: CZ300376

**Popis česky:** Jsou popsány deriváty estradiolu, které jsou ligandy estrogenových receptorů .alfa. a .beta. a jsou účinné např. pro hormonální substituční terapii nebo pro léčení nádorových nebo zánětlivých onemocnění. Dále je popsán způsob přípravy těchto ligandů cyklotrimerizací ethynylestradiolu v organickém rozpouštědle s vhodným diyem a farmaceutická kompozice s jejich obsahem.

**Popis anglicky:** There are described estradiol derivates as ligands of estrogen alpha and beta receptors and they are effective for example for hormonal replacement therapy or for treatment of tumor and inflammatory diseases. Furthermore there is described a method for the preparation of these ligands using ethynylestradiol cyclomerization in an organic solvent with proper diyne and pharmaceutical composition comprising it.

**Využití:** pro hormonální substituční terapii nebo pro léčení nádorových nebo zánětlivých onemocnění.

**Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail):** Martin Kotora, 220180147, Martin.Kotora@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 6

**Název česky:** Nové syntetické peptidy a jejich použití

**Název anglicky:** Novel synthetic peptides and use thereof

**Kategorie:** český patent – chemie přírodních látek

**Zapsán pod číslem:** CZ 301595

**Popis česky:** Popsány jsou nové syntetické analogy peptidu melectinu, původně izolovaného z jedových váček samotářských včel Melecta albifrons, připravené obměnou jeho strukturních jednotek. Tyto látky vykazují antimikrobiální, antivirální, protiplísňovou, antiparazitickou a protirakovinnou aktivitu a jsou tedy vhodné pro výrobu léčiva k léčbě mikrobiálních, virových, parazitických a plísňových onemocnění a pro léčení rakovin.

**Popis anglicky:** Novel synthetic analogs of melectin peptide being originally isolated from poison sac of solitary bees Melecta albifrons, prepared by modification of its structural units. These substances exhibit antimicrobial, antiviral, antifungal, antiparasitic and antineoplastic activity and are therefore suitable for preparing a medicament intended for the treatment of microbial, viral, parasitic and fungal diseases as well as for the treatment of cancers.

**Využití:** pro výrobu léčiva k léčbě mikrobiálních, virových, parazitických a plísňových onemocnění a pro léčení rakovin.

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

Pořadové číslo: 7

**Název česky:** Antimikrobiální peptidy

Název anglicky: Antimicrobial peptides

Kategorie: český patent – chemie přírodních látek

Zapsán pod číslem: CZ301719

Popis česky: Popsány jsou peptidy halictiny o vzorcích (I) a (II) izolované z jedových váčků eusociálních včel *Halictus sexcinctus* a jejich syntetické analogy připravené záměnou aminokyseliny v poloze 4, 11 nebo 12 vzorce (I) nebo v poloze 4 vzorce (II) aminokyselinou Lys, vykazující biologické účinky a jejich použití pro výrobu léčiva k léčbě mikrobiálních, parazitických a plísňových onemocnění a pro léčení rakovin.

Popis anglicky: There are described peptides of the general formulae (I) and (II) isolated from poison bags of eusocial bees *Halictus sexcinctus* and synthetic analogs thereof prepared by replacement of an amino acid in positions 4, 11 or 12 of the general formula (I) or in position 4 of the general formula (II) with the amino acid Lys, exhibiting biological activity, and their use for the preparation of a medicament intended for the treatment of microbial, parasitic and fungal diseases as well as for the treatment of various types of cancer.

Využití: pro výrobu léčiva k léčbě mikrobiálních, parazitických a plísňových onemocnění a pro léčení rakovin.

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

Pořadové číslo: 8

Název česky: 3 $\alpha$ -Hydroxy-21 $\xi$ si,22-oxido-21-homo-5 $\alpha$ -pregnan-20-on, způsob jeho výroby a jeho použití

Název anglicky: 3{alpha}-Hydroxy-21{xi}, 22-oxide-21-homo-5{alpha}-pregnan-20-one, process of its preparation and its use

Kategorie: český patent – organická chemie, medicínální steroidy

Zapsán pod číslem: CZ302050

Popis česky: 3.alfa-Hydroxy-21.ksi.,22-oxido-21-homo-5.alfa.-pregnan-20-on vzorce II a způsob jeho výroby. Sloučeninu lze využít pro výrobu léčiva určeného k předcházení a potlačení epileptických záchvatů.

Popis anglicky: 3{alpha}-Hydroxy-21{xi}, 22-oxide-21-homo-5{alpha}-pregnan-20-one of the general formula II and process of its preparation. The invented compound is further used for the preparation of a medicament intended for prevention and suppression of epileptic fits.

Využití: Pro výrobu léčiva určeného k předcházení a potlačení epileptických záchvatů.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Alexander Kasal, 220183314, Alexandr.Kasal@uochb.cas.cz

Pořadové číslo: 9

Název česky: Peptid, způsob jeho přípravy a jeho použití

Název anglicky: Peptide, process for its preparation and use



Kategorie: český patent – chemie přírodních látek

Zapsán pod číslem: CZ301822

**Popis česky:** Řešení se týká peptidu melectinu, izolovaného z jedových váček samotářských včel *Melecta albifrons*, způsobů jeho přípravy a jeho použití pro výrobu léčiva pro léčení mikrobiálních, virových a plísňových onemocnění a pro léčení rakovin.

**Popis anglicky:** a peptide melectin of the general formula H-Gly-Phe-Leu-Ser-Ile-Leu-Lys-Lys-Val-Leu-Pro-Lys-Val-Met-Ala-His-Met-Lys-NH<sub>2</sub> (I), processes for its preparation and use for preparing a medicament intended for the treatment of microbial, viral and fungal diseases as well as for treating various types of cancer.

**Využití:** pro výrobu léčiva pro léčení mikrobiálních, virových a plísňových onemocnění a pro léčení rakoviny.

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

Pořadové číslo: 10

Název česky: Syntetické peptidy a jejich použití

Název anglicky: Synthetic peptides and their use

Kategorie: český patent – chemie přírodních látek

Zapsán pod číslem: CZ301774

**Popis česky:** Popsány jsou nové syntetické analogy peptidu lasioglossinu III, původně izolovaného z jedových váček divokých včel *Lasioglossum laticeps*, připravené obměnou jeho strukturních jednotek. Tyto látky vykazují antimikrobiální, antivirální, protiplísňovou, antiparazitickou a protirakovinnou aktivitu.

**Popis anglicky:** there are described novel synthetic analogs of lasioglossin III peptide being originally isolated from poison sacs of solitary bees *Lasioglossum laticeps*, prepared by modification of its structural units. These substances exhibit antimicrobial, antiviral, antifungal, antiparasitic and antineoplastic activity.

**Využití:** pro výrobu léčiva k léčbě mikrobiálních, virových, parazitických, plísňových a nádorových onemocnění.

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

Pořadové číslo: 11

Název česky: Přirozené brassinosteroidy pro použití při léčení hyperproliferace, léčení proliferativních onemocnění a redukci nepříznivých účinků steroidních disfunkcí u savců, farmaceutické prostředky je obsahující a jejich použití

Název anglicky: Natural brassinosteroids for use for treating hyperproliferation, treating proliferative diseases and reducing adverse effects of steroid dysfunction in mammals, pharmaceutical composition and its use

Kategorie: organická chemie – medicínální steroidy

Zapsán pod číslem: CZ302293

**Popis česky:** Řešení se týká přirozených brassinosteroidů a jejich derivátů a farmaceutických prostředků je obsahující pro použití při léčení savčích buněk, různých stavů snížení růstu nebo úplné inhibici proliferační kapacity buněk. Vynález také zahrnuje zastavení buněčného cyklu pomocí přirozených brassinosteroidů vedoucích k apoptickým změnám v nádorových buňkách.

**Popis anglicky:** The present invention relates to natural brassinosteroids and a pharmaceutically acceptable salt thereof, for use for treating hyperproliferation, treating proliferative diseases and reducing adverse effects of steroid dysfunction in mammals. The present invention also provides methods capable to arrest of the cell cycle by natural brassinosteroids resulting in apoptotic changes in cancer cells.

**Využití:** použití brassinosteroidů pro léčení nepříznivých účinků hyperproliferace u savčích buněk *in vitro* a *in vivo*.

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

**Pořadové číslo:** 12 a 13

**Název česky:** Nové sloučeniny a metody léčby; pyrimidinové sloučeniny s fosfonátovými skupinami jako antivirotické analogy nukleotidů

**Název anglicky:** Novel compounds and methods for therapy; pyrimidine compounds having phosphonate groups as antiviral nucleotide analogs

**Kategorie:** organická chemie

**Zapsán pod číslem:** AU2004247305 a NZ 543864

**Popis česky:** Řešení se týká nových sloučenin vzorce I a definice jeho substituentů R1, R2, R3, R4, Z, X a \*. Uvedeny jsou také způsoby použití takových sloučenin jako antivirotik a postup jejich syntézy.

**Popis anglicky:** Novel compounds are provided having formula (I) where R1, R2, R3, R4, Z, X and \* are defined herein. Also provided are antiviral methods for use and processes for synthesis of the compounds of formula (I).

**Využití:** látky mohou sloužit jako antivirotika.

**Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail):** Dana Hocková, 220183262, dana.hockova@uochb.cas.cz

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

Pořadové číslo: 1

**Dosažený výsledek:** Obdržen grant Ministerstva vnitra ČR „Cílený vývoj léčiv použitelných k ochraně obyvatelstva před bioterorismem. Vývoj a studium účinných inhibitorů adenylátcyklasového toxinu patogenů *Bordetella pertusis* a *Bacillus anthracis*.“ Zahájena spolupráce s Centrem biologické ochrany (CBO) Těchonín.

**Oblast uplatnění výsledku:** Vývoj antibakteriálních preparátů jako nástroj ochrany obyvatelstva před bioterorismem

**Uživatel/Zadavatel:** Ústřední vojenský zdravotní ústav Praha, Ministerstvo obrany ČR

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

1 Číslo	2 Název	3 Příjemce/Zadavatel	4 Popis výsledku
1	Posudky projektů pro české i zahraniční grantové agentury	GAČR, GAAV, MPO, MZ, MZV, MPO, AERES, DFG	150
2	Posudky grantů a řešení Centrum, NPVII, NAZV	MŠMT, MZe	20
3	Posudky na diplomové a disertační práce	Vysoké školy	160

**Celkový počet zpracovaných expertiz**

330

### 4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracovišť

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

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Koordinátor/ řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
1	HFSP0	Human Frontier Science Program	- / Probing the mechanism of the cleavage reaction in catalytic RNAs	koordinátor: Tanaka – Japan řešitel ÚOCHB: Sychrovský	Kato- Japan Matsuda- Japan / 3	USA, Japonsko	
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	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			
4	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Studium biologicky aktivních látek využitelných pro kontrolu zavíječe Eusophera batangensis, škůdce ovocné dřeviny cicimku jujuba (Ziziphus jujuba)/ Research of biologically active compounds for the control of the Moth	Hoskovec	Xiun Wen + Zhang Zhen	Čína	

1	2	3	4	5	6	7	8
Číslo	Název zastrešující organizace (zkratka)	Název programu česky/anglicky	Název projektu česky/anglicky	Koordinátor/ řešitel česky/anglicky	Spoluřešitel /počet	Stát(y)	Aktivita
			Euzophera batangensis, a serious pest of jujuba trees (Ziziphus jujuba)				
5	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	
6	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	
7	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Dvou a trojrozměrná pole molekulárních rotorů: Nové materiály pro nanotechnologie/ 2&3-D Arrays of Molecular Rotors:New Materials for Nanotechnology	Vacek	Josef Michl, University of Colorado, Boulder	USA	

1	2	3	4	5	6	7	8
Číslo	Název zastřešující organizace (zkratka)	Název programu česky/anglicky	Název projektu česky/anglicky	Koordinátor/ řešitel česky/anglicky	Spoluřešitel /počet	Stát(y)	Aktivita
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 mobilita/ KONTAKT mobility	Fotodisociace atmosféricky relevantních molekul adsorbovaných na povrchu ledu / Photodissociation of atmospherically relevant molecules adsorbed at the surface of ice	Roeselová	Celine Toubin Univ. des Sciences et Tech. de Lille	Francie	
12	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Příprava peptidomimetických profarmak acyklických nukleosidfosfonátů jako antivirotik se zvýšenou biologickou využitelností/ Preparation of Peptidomimetic Prodrugs of Acyclic	Krečmerová	University of Southern Kalifornia, Ch. McKenna	USA	výzkum

1	2	3	4	5	6	7	8
Číslo	Název zastrešující organizace (zkratka)	Název programu česky/anglicky	Název projektu česky/anglicky	Koordinátor/ řešitel česky/anglicky	Spoluřešitel /počet	Stát(y)	Aktivita
			Nucleoside Phosphonates as Antivirals with Improved Bioavailability				
13	MŠMT	KONTAKT/ KONTAKT	Modelování fyzisorpce vodíku a skleníkových plynů v porézních materiálech/ Fysiosorption of hydrogen and greenhouse gases in porous materials. Theoretical and experimental investigation	Koordinátor: Nachtigall - PŘF UK řešitel ÚOCHB - Bludský	University of Pittsburgh, K.D. Jordan	USA	výzkum
14	IAEA	Resolution of cryptic species complexes of Tephritid pests	Analysis of Epicuticular Composition in Genera Anastrepha and Ceratits	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
15	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Spektroskopické studie konformačního chování proteinů/ Spectroscopic Monitoring of Protein Folding	Bouř	University of Wyoming, Laramie, University of Illinois, Chicago, University of Tromsø	USA, Norsko	výzkum, vzdělávání

1	2	3	4	5	6	7	8
Číslo	Název zastřešující organizace (zkratka)	Název programu česky/anglicky	Název projektu česky/anglicky	Koordinátor/ řešitel česky/anglicky	Spoluřešitel /počet	Stát(y)	Aktivita
16	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
17	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
18	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
19	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Složité architektury polyolefinů vznikající Li+ katalyzovanou polymerací/ Complex Architectures of Polyolefins by Li+ catalyzed Polymerization	Michl	MPG Mainz, GAU Goettingen	Německo	výzkum



1	2	3	4	5	6	7	8
Číslo	Název zastřešující organizace (zkratka)	Název programu česky/anglicky	Název projektu česky/anglicky	Koordinátor/ řešitel česky/anglicky	Spoluřešitel /počet	Stát(y)	Aktivita
20	AV ČR	Podpora projektů mezinárodní spolupráce	Rigidní cyklodextrinové duplexy jako divalentní spojky pro 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	Kraus	University of Twente, Enschede	Holandsko	výzkum
21	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

4b) 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	Mezinárodní konference EDUCO 2010	International conference EDUCO 2010	Radmila Dytrtova	56/10	2 workshops from IOCB
2	Pražské proteinové jaro 2010	Prague's Protein Spring 2010	J. Vondrášek	54/29	
3	FEBS pokročilý kurz: Pokročilé metody krystalizace bílkovin	FEBS Advanced Course: Advanced Methods in Protein Crystallization IV	Ivana Kutá Smatanová Ústav systémové biologie a ekologie AV ČR/Institute of System Biology and Ecology AS CR	49/40	
4	IOCB a ISOC workshop, Šanghaj	IOCB and ISOC workshop, Shanghai	Z. Havlas, D. Ma	90/80	Prezentace ústavu

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

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
	<b>Zvané přednášky</b>			
1	Prof. Aalt BAST	Antioxidanty jako léčiva	University of Maastricht	The Netherlands
2	Prof. John E. WALKER	Konverse energie v biologii	Cambridge	UK
3	Prof. Antonio M. ECHAVARREN	Katalýza s využitím Au	ICR of Catalonia, Tarragona	Spain
4	Prof. J. Michael McBRIDE	Historie původu homochiralita	Yale University	USA
5	Prof. Carl DJERASSI	Chemická historie původu pilulek	Stanford University	USA
6	Prof. Ben L. FERINGA	Kontrola molekulárního pohybu	University of Groningen	The Netherlands
7	Prof. David MILSTEIN	Design nových katalytických reakcí	Weizmann Institute, Rehovot	Israel
8	Prof. Kenso SOAI	Asymetrická autokatalýza	Tokyo University	Japan
9	Prof. Cynthia J. BURROWS	Mechanismus oxidace guaninu	University of Utah	USA
10	Prof. Gregory C. FU	Pd- a Ni- katalyzované reakce	MIT, Cambridge	USA

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
11	Prof. Jacqueline K. BARTON	DNA-zprostředkovaná signalizace	California Inst. Technol., Pasadena	USA
12	Prof. C. Oliver KAPPE	Organická syntéza za účasti mikrovln	University of Graz	Austria
13	Prof. Janisz M. BUJNICKI	Nové metody predikce 3D struktury RNA a RNP	International Inst. of Molecular and Cell Biology, Warsaw	Poland
14	Prof. Burkhard KÖNIG	Syntetické receptory pro selektivní katalýzu	Universität Regensburg	Germany
	<b>Ostatní přednášky</b>			
1	Alexander Kiss, Zdeno Pirník	Endokrinologie, neuroanatomie	Ústav experimentálnej endokrinológie SAV, Bratislava	Slovakia
2	Marie-Christine Galas	Biochemie	INSERM, Lille	France
3	Andrzej Marek Brzozowski	Strukturní biologie, krystalografie	University of York, York	UK
4	Prof. Charles. E. McKenna	Přední odborník v oboru nukleosidové a nukleotidové chemie a chemie organofosfátů	University of Southern California (Los Angeles)	USA
5	Tomas Cihlar, PhD.	Odborník v oboru vývoje léčiv (biochemie, biologie)	Gilead Sciences, Inc.	USA
6	Richard Mackman, PhD.	Vývoj léčiv (organická chemie, biochemie)	Gilead Sciences, Inc.	USA
7	William Lee, PhD.	Vývoj léčiv (organická chemie, biochemie)	Gilead Sciences, Inc.	USA
8	Mary McGrath, PhD.	Vývoj léčiv (organická a strukturní chemie)	Gilead Sciences, Inc.	USA
9	Dr. Xiaojun Li	Výpočetní chemie	University of Tromso	Norway
10	Dr. Kathrin Hopmann	Teoretická organická chemie	University of Tromso	Norway
11	Dr. Christian Johannessen	Spektroskopie	University of Glasgow	UK
12	Prof. Jan Kubelka	Spektroskopie a fyzika peptidů	University of Wyoming	USA
13	Prof. Paul Cremer	Fyzikální chemie	Texas A&M University	USA
14	Prof. Damine Laage	Fyzikální chemie	ENS Paris	France
15	Dr. Bernd Winter	Fyzika	Helmholtz Zentrum Berlin	Germany
16	Dr. Garry Thompson	Fyzikální chemie	University of Leeds	UK
17	Prof. Klaus Muller-Dethlefs	Fyzikální chemie, spektroskopie	University of Manchester	UK
18	Prof. Kevin Riley	Teoretická chemie	University of Puberto Rico	USA
19	Dr. Aurelien de la Lande	Výpočetní chemie	Université Paris-Sud	France
20	Prof. Wolfgang Kraemer	Fyzikální chemie	MPI Garching	Germany
21	Prof. Hans Lischka	Teoretická chemie	University of Vienna	Austria
22	Dr. Ernesto Moreno Frias	Výpočetní chemie	University of Havana	Cuba
23	Dr. Miroslav Melicherčík	Fyzikální chemie	Univerzita Komenského, Bratislava	Slovakia

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
24	Dr. Tadeusz Pluta	Teoretická chemie	Institut Slaski-Katowice	Poland
25	Dr. Wiktor Zierkiewicz	Teoretická chemie	Wroclaw University	Poland
26	Prof. Pierre Rasmont	Biolog, autorita v oboru taxonomie včelovitého hmyzu	Université Mons	Belgium
27	Dr. Frederic Lamaty	Transition metal chemistry, oxidation, Organic synthesis amino acids	Universite Montpellier II	France
28	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	France
29	Prof. Alejandro Cifuentes	Přední světový odborník v oblasti elektroseparačních metod	Institut of Industrial Fermentations, CSIC, Madrid	Spain

#### 4d) aktuální meziústavní dvoustranné dohody

1 Číslo	2 Spolupracující instituce	3 Stát	4 Oblast (téma) spolupráce
1	WEHI, Parkville, Victoria	Australia	Krystalizace komplexu insulinu a jeho receptoru
2	Rega Institute of Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven	Belgium	Testování protivirové aktivity látek
3	University of Southern California	USA	Vývoj peptidických profarmak acyklických nukleosidfosfonátů
4	Gilead Sciences, Inc.	USA	Vývoj léčiv
5	University of Queensland, Brisbane	Australia	Testování antimalarické aktivity látek
6	Ústřední vojenský zdravotní ústav Praha, Ministerstvo obrany ČR	Czech Republic	Testování antibiotických aktivit látek
7	Max Planck Institute for Physics of Complex Systems, Dresden	Germany	Mezinárodní postgraduální škola
8	University College London	UK	Reactivity of gaseous dications
9	Max Planck Institute for Chemical Ecology, Jena	Germany	Biosyntéza hmyzích feromonů
10	North Carolina State University, Department of Chemical and Biochemical Engineering, Raleigh	USA	Synthesis of functional polymeric materials

1 Číslo	2 Spolupracující instituce	3 Stát	4 Oblast (téma) spolupráce
11	CONICET	Argentina	Neuroaktivní steroidy

## 5. Seznam citací

1. Bárta, J. - Slavětínská, L. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: Modular Synthesis of 5-Substituted Furan-2-yl C-2'-Deoxyribonucleosides and Biaryl Covalent Base-pair Analogues. *European Journal of Organic Chemistry*. č. 28 (2010), s. 5432-5443.
2. Bobula, T. - Hocek, M. - Katora, M.: Sonogashira reactions of alpha and beta-1-ethynyl-2-deoxyribosides: synthesis of acetylene-extended C-nucleosides. *Tetrahedron*. Roč. 66, č. 2 (2010), s. 530-536.
3. Čerňa, I. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: Intramolecular Direct C-H Arylation Approach to Fused Purines. Synthesis of Purino[8,9-f]phenanthridines and 5,6-Dihydropurino[8,9-a]isoquinolines. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 75, č. 7 (2010), s. 2302-2308.
4. Hasník, Z. - Pohl, R. - Hocek, M.: Synthesis of (Purin-6-yl)methylphosphonate Bases and Nucleosides. *Tetrahedron Letters*. Roč. 51, č. 18 (2010), s. 2464-2466.
5. Ikonen, S. - Macíčková-Cahová, H. - Pohl, R. - Šanda, M. - Hocek, M.: Synthesis of nucleoside and nucleotide conjugates of bile acids, and polymerase construction of bile acid-functionalized DNA. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 8, č. 5 (2010), s. 1194-1201.
6. Kubelka, T. - Slavětínská, L. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: Synthesis of 2,4-Disubstituted Pyrimidin-5-yl C-2'-Deoxyribonucleosides by Sequential Regioselective Reactions of 2,4-Dichloropyrimidine Nucleosides. *European Journal of Organic Chemistry*. -, č. 14 (2010), s. 2666-2669.
7. Marek, R. - Křístková, A. - Maliňáková, K. - Toušek, J. - Marek, J. - Hocek, M. - Malkina, O. L. - Malkin, V. G.: Interpretation of Indirect Nuclear Spin-Spin Couplings in Isomers of Adenine: Novel Approach to Analyze Coupling Electron Deformation Density Using Localized Molecular Orbitals. *Journal of Physical Chemistry A*. Roč. 114, č. 24 (2010), s. 6689-6700.
8. Standara, S. - Maliňáková, K. - Marek, R. - Marek, J. - Hocek, M. - Vaara, J. - Straka, M.: Understanding the NMR chemical shifts for 6-halopurines: role of structure, solvent and relativistic effects. *Physical Chemistry Chemical Physics*. Roč. 12, č. 19 (2010), s. 5126-5139.

9. Nauš, P. - Pohl, R. - Votruba, I. - Džubák, P. - Hajdúch, M. - Ameral, R. - Birkuš, G. - Wang, T. - Ray, A. S. - Mackman, R. - Cihlar, T. - Hocek, M.: 6-(Het)aryl-7-Deazapurine Ribonucleosides as Novel Potent Cytostatic Agents. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 53, č. 1 (2010), s. 460-470.
10. Bourderioux, A. - Nauš, P. - Hocek, M. Novel 7-deazapurine nucleosides for therapeutic uses. PCT/CZ2010/000050. - patentová přihláška
11. Raindlová, V. - Pohl, R. - Šanda, M. - Hocek, M.: Direct polymerase synthesis of reactive aldehyde-functionalized DNA and its conjugation and staining with hydrazines. *Angewandte Chemie. International Edition*. Roč. 49, č. 6 (2010), s. 1064-1066.
12. Spáčilová, P. - Nauš, P. - Pohl, R. - Votruba, I. - Snášel, J. - Záborská, H. - Pichová, I. - Ameral, R. - Birkuš, G. - Cihlař, T. - Hocek, M.: CycloSal-Phosphate Pronucleotides of Cytostatic 6-(Het)aryl-7-Deazapurine Ribonucleosides: Synthesis, Cytostatic Activity, and Inhibition of Adenosine Kinases. *ChemMedChem*. Roč. 5, č. 8 (2010), s. 1386-1396.
13. Štefko, M. - Slavětinská, L. - Klepetářová, B. - Hocek, M.: A General and Efficient Synthesis of Pyridin-2-yl C-Ribonucleosides Bearing Diverse Alkyl, Aryl, Amino and Carbamoyl Groups in Position 6. *Journal of Organic Chemistry*. Roč. 75, č. 2 (2010), s. 442-449.
14. Štefko, M. - Hocek, M.: Synthesis of Phenol and Pyridone C-Ribo-and 2'-Deoxyribonucleosides by Palladium-Catalyzed Hydroxylations of Haloaryl C-Nucleosides. *Synthesis*. č. 24 (2010), s. 4199-4206.
15. Urban, M. - Joubert, N. - Purse, B. W. - Hocek, M. - Kuchta, R. D.: Mechanisms by Which Human DNA Primase Chooses To Polymerize a Nucleoside Triphosphate. *Biochemistry*. Roč. 49, č. 4 (2010), s. 727-735.
16. Vlašáná, K. - Hrdina, R. - Valterová, I. - Kotora, M.: Enantioselective Allylation of Aldehydes Catalyzed by Diastereoisomeric Bis(tetrahydroisoquinoline) *N,N'*-Dioxides. *European Journal of Organic Chemistry*, č. 36 (2010), s. 7040-7044.
17. Řezanka, M. - Eignerová, B. - Jindřich, J. - Kotora, M.: Synthesis of Mono(perfluoroalkyl) Cyclodextrins via Cross Metathesis. *European Journal of Organic Chemistry*, (2010), č. 32, s. 6256-6262.
18. Eignerová, B. - Sedlák, D. - Dračinský, M. - Bartůněk, P. - Kotora, M.: Synthesis and Biochemical Characterization of a Series of 17 $\alpha$ -Perfluoroalkylated Estradiols as Selective Ligands for Estrogen Receptor  $\alpha$ . *Journal of Medicinal Chemistry*, roč. 53 (2010), č. 19, s. 6947-6953.
19. Kotora, M.: Synthesis of axially chiral bipyridine *N,N'*-dioxides and enantioselective allylation of aldehydes. *Pure and Applied Chemistry*, roč. 82 (2010), č. 9, s. 1813–1826.
20. Opekar, S. - Turek, P. - Pohl, R. - Klepetářová, B. - Votruba, I. - Hocek, M. - Kotora, M.: [2+2+2]-Cocyclotrimerization of 6-Alkynyl-7-benzylpurines with  $\alpha,\omega$ -Dienes. *Heterocycles*, roč. 82 (2010), č. 1, s. 895-907.
21. Kadlčíková, A.; Valterová, I.; Ducháčková, L.; Roithová, J.; Kotora, M. Lewis Base-Catalyzed Enantioselective Allylation of  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Aldehydes. *Chemistry - a European Journal*, roč. 16 (2010), č. 31, s. 9442–9445.
22. Sedlák, D.- Novák, P. - Kotora, M. - Bartůněk, P.: Synthesis and Evaluation of 17 $\beta$ -Arylestradiols as Ligands for Estrogen Receptor  $\alpha$  and  $\beta$ . *Journal of Medicinal Chemistry*, roč. 53 (2010), č. 10, s. 4290-4294.

23. Eignerová, B. - Janoušek, Z. - Dračínský, M. - Katora, M.: Synthesis of Perfluoroalkylated Carboranes by Cross-metathesis of Allylcarboranes and Perfluoroalkylpropenes. *Synlett*, (2010), č. 6, s. 885–887.
24. Dračínský, M. - Castaño, O. - Katora, M.: Substituent Induced Rearrangement of Dewar Benzene Studied by DFT. *Journal of Organic Chemistry*, roč. 75 (2010), č. 3, s. 576–581.
25. Betík, R.- Herrmann, P. - Katora, M.: Synthesis of an (±)-Estrone Precursor: the Scope of Zr- and Co-mediated Cycloannulations. *European Journal of Organic Chemistry*, (2010), č. 4, s. 646–655.
26. Matyšková, R. - Železná, B. - Maixnerová, J. - Koutová, D. - Haluzík, M. – Maletínská, L.: Estradiol Supplementation Helps Overcome Central Leptin Resistance of Ovariectomized Mice on a High Fat Diet. *Hormone and Metabolic Research*. Roč. 15, č. 1 (2010), s. 182-186.
27. Jiráček, J. - Žáková, L. - Antolíková, E. - Watson, C. J. - Turkenburg, J. P. - Dodson, G. G. - Brzozowski, A. M.: Implications for the active form of human insulin based on the structural convergence of highly active hormone analogues. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. Roč. 107, č. 5 (2010), s. 1966-1970.
28. Krečmerová, M. – Holý, A. – Andrei, G. – Pomeisl, K. Tichý, T. - Břehová, P. – Masojídková, M., Dračínský M. – Pohl, R. – Laflamme, G. – Naesens, L. – Hui, H. – Cihlar, T. – Neyts, J. – De Clercq, E. – Balzarini, J. – Snoeck, R.: Synthesis of ester prodrugs of 9-(S)-[3-hydroxy-2-(phosphonomethoxy)propyl]-2,6-diaminopurine (HPMPDAP) as anti-poxvirus agents. *Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 53, č. 19 (2010), s. 6825-6837.
29. Krečmerová, M. – Masojídková, M.- Holý, A.: Acyclic nucleoside phosphonates with 5-azacytosine base moiety substituted in C-6 position. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. Roč. 18, č. 1 (2010), s. 387-395.
30. Keough, D.T. – Hocková, D. – Krečmerová, M. – Česnek, M. – Holý, A. – Naesens, L. – Brereton, I.M. – Winzor, D.J. – de Jersey, J. – Guddat, L.W.: Plasmodium vivax hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase: A target for antimalarial chemotherapy. *Molecular & Biochemical Parasitology*. Roč. 173, č. 2 (2010), s. 165-169.
31. Hocková, D. – Dračínský, M. – Holý, A.: Synthesis and properties of a novel type of acyclic nucleoside phosphonates: 2-(Purin-9-yl)ethoxyphenylphosphonic acids. *European Journal of Organic Chemistry* (2010), s. 2885-2892.
32. Keough, D.T. – Hocková, D. – Krečmerová, M. – Česnek, M. – Holý, A. – Naesens, L. – Brereton, I.M. – Winzor, D.J. – de Jersey, J. – Guddat, L.W.: Plasmodium vivax hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase: A target for antimalarial chemotherapy. *Molecular & Biochemical Parasitology*. Roč. 173, č. 2 (2010), s. 165-169.
33. Nencka, R. - Sinnaeve, D. - Karalic, I. - Martins, J. C. - Van Calenbergh, S.: Synthesis of C-6-substituted uridine phosphonates through aerobic ligand-free Suzuki-Miyaura cross-coupling. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Roč. 8, č. 22 (2010), s. 5234-5246.
34. Šála, M. - De Palma, A. M. - Hřebabecký, H. - Nencka, R. - Dračínský, M. - Leyssen, P. - Neyts, J. - Holý, A.: Design, synthesis, and biological evaluation of novel coxsackievirus B3 inhibitors. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. Roč. 18, č. 12 (2010), s. 4374-4384.

35. Böhmová, K. – Hadravová, R. - Štokrová, J. - Tůma, R. - Ruml, T. - Pichová, I. - Rumlová, M.: The effect of dimerizing domains and basic residues on in vitro and in vivo assembly of Mason-Pfizer monkey virus and Human immunodeficiency virus. *Journal of Virology* Roč. 84, č.4, (2010), s. 1977-1988.
36. Zábanský, A. - Hoboth, P. - Hadravová, R. - Štokrová, J. - Sakalian, M. - Pichová, I.: The noncanonical Gag domains p8 and n are critical for assembly and release of mouse mammary tumor virus. *Journal of Virology* Roč. 84, č. 24, (2010) s. 11555-9.
37. Elbert, T. - Břehová, P. - Holý, A.: The preparation of 3-H-labeled Acyclic Nucleoside Phosphonates and Study of their Stability. *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Roč. 75, č. 7 (2010), s. 757-766.
38. Johnson, J.C. - Nozik, A.J. - Michl, J.: High Triplet Yield from Singlet Fission in a Thin Film of 1,3-Diphenylisobenzofuran. *J. Am. Chem. Soc.* Roč. 132, č. 46 (2010) s. 16302–16303.
39. Andrew F. Schwerin, A.F. - Johnson, J.C. - Smith, M.B. - Sreearunothai, P. - Popovič, D. - Černý, J. - Havlas, Z. - Paci, I. - Akdag, A. - MacLeod, M.K. - Chen, X. - David, D.E. - Ratner, M.A. - Miller, J.R. - Nozik, A.J. - Michl, J.: Toward Designed Singlet Fission: Electronic States and Photophysics of 1,3-Diphenylisobenzofuran. *J. Phys. Chem. A*. Roč. 114, č. 3 (2010) s. 1457–1473.
40. Greyson, E.C. - Vura-Weis, J. - Michl, J. – Ratner, M.A.: Maximizing Singlet Fission in Organic Dimers: Theoretical Investigation of Triplet Yield in the Regime of Localized Excitation and Fast Coherent Electron Transfer. *J. Phys. Chem. B*. Roč. 114, č. 45 (2010) s. 14168–14177.
41. Greyson, E.C. – Stepp B.R. – Chen, X. - Schwerin, A.F. - Paci, I. - Smith, M.B. - Akdag, A. – Johnson J.C. - Nozik, A.J. - Michl, J. - Ratner, M.A.: Singlet Exciton Fission for Solar Cell Applications: Energy Aspects of Interchromophore Coupling. *J. Phys. Chem. B*. Roč. 114, č. 45 (2010) s. 14223–14232.
42. Smith, M.B. - Michl, J.: Singlet Fission. *Chem. Rev.* Roč. 110, č. 11 (2010), s. 6891–6936.
43. Mulcahy, M.E. - Bastl, Z. - Stensrud, K.F. - Magnera, T.F. – Michl, J.: Mercury-Mediated Attachment of Metal-Sandwich-Based Altitudinal Molecular Rotors to Gold Surfaces, *J. Phys. Chem. C*. Roč. 114, č. 33 (2010) s. 14050–14060.
44. Von Wrochem, F. - Scholz, F. - Gao, D. - Nothofer, H.-G. - Yasuda, A. – Wessels, J.M. - Roy, S. - Chen, X. - Michl, J.: High-Band-Gap Polycrystalline Monolayers of a 12-Vertex p-Carborane on Au(111). *J. Phys. Chem. Lett.* Roč. 1, č. 24 (2010) s. 3471–3477.
45. Valášek, M. - Štursa, J.- Pohl, R. – Michl, J.: Lithium Salts of [1,12-Dialkyl-CB11Me10]- Anions. *Inorg. Chem.* Roč. 49, č. 22 (2010), s. 10255–10263.
46. Kaleta, J. - Michl, J. - Mazal, C.: T-Shaped Molecular Building Blocks by Combined Bridgehead and Bridge Substitution on Bicyclo[1.1.1]pentanes. *J. Org. Chem.* Roč. 75, č. 7 (2010) s. 2350–2356.
47. Khobragade, D. - Stensrud, E.S. - Mucha, M. - Smith, J.R. - Pohl, R. - Stibor, I. - Michl, J.: Preparation of Covalent Long-Chain Trialkylstannyl and Trialkylsilyl Salts and an Examination of their Adsorption on Gold. *Langmuir*. Roč. 26, č. 11 (2010) s. 8483–8490.



48. Lepšík, M. - Srnec, M. - Plešek, J. - Buděšínský, M. - Klepetářová, B. - Hnyk, D. - Grüner, B. - Rulíšek, L.: Thiocyanation of closo-Dodecaborate B<sub>12</sub>H<sub>12</sub>2 . A Novel Synthetic Route and Theoretical Elucidation of the Reaction Mechanism. *Inorg. Chem.*, Roč. 49, č. 19 (2010), s. 5040-5048.
49. Beššeová, I. - Réblová, K. - Leontis, N. B. - Šponer, J.: Molecular dynamics simulations suggest that RNA three-way junctions can act as flexible RNA structural elements in the ribosome. *Nucleic Acid. Res.* Roč. 38, č. 18 (2010), s. 6247-6264.
50. Vancoillie, S. - Chalupský, J. - Ryde, U. - Solomon, E. I. - Pierloot, K. - Neese, F. - Rulíšek, L.: Multireference Ab Initio Calculations of g tensors for Trinuclear Copper Clusters in Multicopper Oxidases. *J. Phys. Chem. B.* Roč. 114, č. 22 (2010), s. 7692-7702.
51. Mertlíková-Kaiserová, H. - Votruba, I. - Matoušová, M. - Holý, A. - Hájek, M.: Role of Caspases and CD95/Fas in the Apoptotic Effects of a Nucleotide Analog PMEG in CCRF-CEM Cells. *Anticancer Res.* Roč. 30, č. 7 (2010), s. 2791-2798.
52. Hájek, M. - Cvilink, V. - Votruba, I. - Holý, A. - Mertlíková-Kaiserová, H.: Distinct modulation of telomere length in two T-lymphoblastic leukemia cell lines by cytotoxic nucleoside phosphonates PMEG and PMEDAP. *Eur. J. Pharmacol.* Roč. 643, č. 1 (2010), s. 6-12.
53. Špak, J. – Holý, A. – Pavingerová, D. – Votruba, I. – Špaková, V. – Petrzik, K.: New in vitro method for evaluating antiviral activity of acyclic nucleoside phosphonates against plant viruses. *Antiviral Res.* Roč. 88, č. 3 (2010), s. 296-303.
54. Kumprecht, L. - Buděšínský, M. - Bouř, P. - Kraus, T.: Alpha-cyclodextrins reversibly capped with disulfide bonds. *New Journal of Chemistry.* Roč. 34, č. 10 (2010), s. 2254-2260.
55. Mojr, V. - Herzig, V. - Buděšínský, M. - Cibulka, R. - Kraus, T.: Flavin-cyclodextrin conjugates as catalysts of enantioselective sulfoxidations with hydrogen peroxide in aqueous media. *Chemical Communications.* Roč. 46, č. 40 (2010), s. 7599-7601.
56. Cherkupally, P.- Beier, P.: Alkoxide-induced nucleophilic trifluoromethylation using diethyl trifluoromethylphosphonate. *Tetrahedron Lett.* Roč. 51, č. 2 (2010), s. 252–255.
57. Benda, L. – Straka, M. – Tanaka, Y. – Sychrovský, V.: On the role of mercury in the non-covalent stabilisation of consecutive U–HgII–U metal-mediated nucleic acid base pairs: metallophilic attraction enters the world of nucleic acids. *Physical Chemistry Chemical Physics.* Roč. 13, č. 1, (2011), DOI: 10.1039/c0cp01534b.
58. Yamamoto, S. - Straka, M. - Watarai, H. - Bouř, P.: Formation and structure of the potassium complex of valinomycin in solution studied by Raman optical activity spectroscopy. *Physical Chemistry Chemical Physics.* Roč. 12 (2010), s. 11021-11032.
59. Hudecová, J. - Kapitán, J. - Baumruk, V. - Hammer, R. P. - Keiderling, T. A. - Bouř, P.: Side Chain and Flexibility Contributions to the Raman Optical Activity Spectra of a Model Cyclic Hexapeptide. *Journal of Physical Chemistry A.* Roč. 114 (2010), s. 7642-7651.
60. Casillas-Ituarte, N.N. - Callahan, K.M. - Tang, C.Y. - Chen, X. - Roeselová, M. - Tobias, D.J. - Allen, H.C.: Surface organization of aqueous MgCl<sub>2</sub> and application to atmospheric marine aerosol chemistry. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, Roč. 107(2010) s. 6616-6621.
61. Marsalek, O. - Frigato, T. – VandeVondele, J. - Bradforth, S. E. - Schmidt, B. - Schuette, C. – Jungwirth, P.: Hydrogen forms in water by proton transfer to a distorted electron. *J. Phys. Chem. B.* Roč. 114(2010) s. 915-920.

62. Marsalek, O. - Uhlig, F. - Frigato, T. - Schmidt, B. - Jungwirth, P.: Dynamics of Electron Localization in Warm versus Cold Water Clusters. *Phys. Rev. Lett.*, Roč. 114(2010) 043002-1-4.
63. Agrawal, D. - Zins, E.L. - Schröder, D.: Intramolecular scrambling of aryl groups in organopalladium complexes [ArPd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>: From solution to the gas phase, back again and in-between *Chemistry - An Asian Journal* Roč. 5, č. 7 (2010) s. 1667-1676.
64. Agrawal, D. - Schröder, D. - Sales, D. A. - Lloyd-Jones, G. C.: Electro spray Mass Spectrometric Studies of Two Palladium–Allyl Complexes of the Trost Standard Ligand. *Organometallics*, Roč. 29 (2010) s. 3979–3986.
65. Riley, K. E. - Pitoňák, M. - Jurečka, P. – Hobza, P.: Stabilization and Structure Calculations for Noncovalent Interactions in Extended Molecular Systems Based on Wave Function and Density Functional Theories, *Chemical Reviews*. Roč. 110, č. 9 (2010), s. 5023-5063.
66. Fanfrlík, J. – Bronowska, A. K. – Řezáč, J. – Přenosil, O. – Konvalinka, J. – Hobza, P.: A Reliable Docking/Scoring Scheme Based on the Semiempirical Quantum Mechanical PM6-DH2 Method Accurately Covering Dispersion and H-Bonding: HIV-1 Protease with 22 Ligands. *Journal of Physical Chemistry B*: Roč. 114, č. 39 (2010), s. 12666-12678.
67. Barbatti, M. - Aquino, A. J. A., - Szymczak, J., J. – Nachtigallová, D., - Hobza, P. – Lischka, H.: Relaxation mechanisms of UV-photoexcited DNA and RNA nucleobases. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. Roč. 107, č. 50 (2010), s. 21453-21458.
68. Hanus, R. - Vrkoslav, V. - Hrdý, I. - Cvačka, J. - Šobotník, J.: Beyond cuticular hydrocarbons: Evidence of proteinaceous secretion specific to termite kings and queens. *Proceedings of the Royal Society of London. B - Biological Sciences*. Roč. 277, č. 1684 (2010), s. 995-1002.
69. Šobotník, J. - Bourguignon, T. - Hanus, R. - Sillam-Dusses, D. - Pfliegerová, J. - Weyda, F. - Kotalová, K. - Vytisková, B. - Roisin, Y.: Not Only Soldiers Have Weapons: Evolution of the Frontal Gland in Imagoes of the Termite Families Rhinotermitidae and Serritermitidae. *PLoS ONE*. Roč. 5, č. 12 (2010), e15761/1-e15761/7.
70. Šobotník, J. - Jirošová, A. - Hanus, R.: Chemical warfare in termites. *Journal of Insect Physiology*. Roč. 56, - (2010), s. 1012-1021.
71. Čeřovský, V. – Žďárek, J. – Fučík, V. – Monincová, L. – Voburka, Z. – Bém, R.: Lucifensin, the long-sought antimicrobial factor of medicinal maggots of the blowfly *Lucilia sericata*. *Cellular and Molecular Life Sciences*. Roč. 67, č. 3 (2010), s. 455-466.
72. Monincová, L. – Buděšínský, M. – Slaninová, J. - Hovorka, O. – Cvačka, J. - Voburka, Z. – Fučík, V. Borovičková, L. - Bednářová, L. – Straka, J. - Čeřovský, V.: Novel antimicrobial peptides from the venom of the eusocial bee *Halictus sexcinctus* (Hymenoptera: Halictidae) and their analogs. *Amino Acids*. Roč. 39, č. 3 (2010), s. 763-775.
73. Jahn, U. - Dinca, E.: Toward the Elucidation of the Metabolism of 15-E2-Isoprostane: The Total Synthesis of the Methyl Ester of a Potential Central Metabolite. *J. Org. Chem.*, Roč. 75, (2010), s. 4480-4491.
74. Zöllner, M. J. - Becker, E. - Jahn, U. - Kowalsky, W. - Johannes, H.-H.: New Versatile Strategy towards Zinc(II)-, Copper(II)- and Cobalt(II)-Metallated Thiophene/Porphyrin-Hybrids. *Eur. J. Org. Chem.* (2010), 4426-4435.

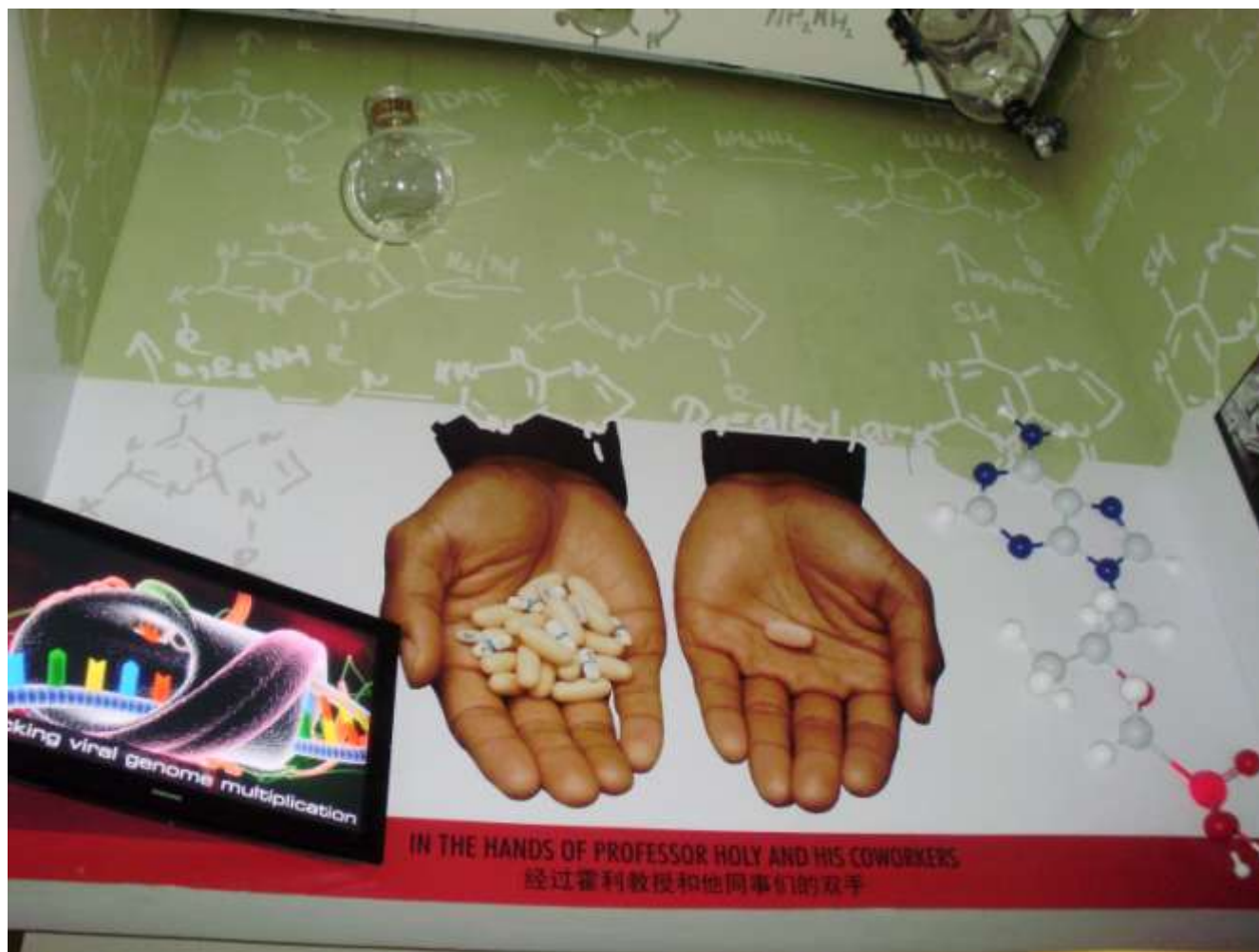
75. Zöllner, M. J. - Frähmcke, J. S. - Elstner, M. - Jahn, U. - Jones, P. G. - Becker, E. - Kowalsky, W. - Johannes, H.-H.: A New Synthetic Approach to Thiophene-Nickel(II)porphyrin Hybrid Molecules and their Electrochemical and Computational Investigation. *Macromol. Chem. Phys.*, Roč. 211, (2010), s. 359-371.
76. Puget, B. - Jahn, U.:  $\beta,\beta$ -Disilylated Sulfones as Versatile Building Blocks in Organic Chemistry – A New Sulfonyl Carbanion Transmetalation. *Synlett* (2010), s. 2579-2582.
77. Jahn, U. - Galano, J.-M. - Durand, T.: A cautionary note on the correct structure assignment of phytosteranes and the emergence of a new prostane ring system. *Prostaglandins, Leukotrienes Essent. Fatty Acids*, Roč. 82, (2010), s. 83-86.
78. Hyvl, J. – Šrogl, J.: Copper Catalyzed Activation of Disulfides as a Key Step in Synthesis of Benzothiazole Moieties. *Eur. J. Org. Chem.* Roč. 15 (2010), s. 2849-2851.
79. Martínek, M. – Korf, M. – Šrogl, J.: Ascorbate mediated copper catalyzed reductive cross-coupling of disulfides with aryl iodides. *Chem. Commun.* Roč. 46 (2010), s. 4387-4389.
80. Henke, A. – Šrogl, J.: Cu and Ag catalyzed arylthiation of terminal acetylenes. *Chem. Commun.*, Roč. 46 (2010), s. 6819-6821.
81. Salát, J. - Paesen, G.C. - Řezáčová, P. - Kotsyfakis, M. - Kovářová, Z. - Šanda, M. - Majtán, J. - Grunclová, L. - Horká, H. - Andersen, J.F. - Brynda, J. - Horn, M. - Nunn, M.A. - Kopáček, P. - Kopecký, J. - Mareš M.: Crystal structure and functional characterization of an immunomodulatory salivary cystatin from the soft tick *Ornithodoros moubata*. *Biochem. J.* Roč. 429, č. 1 (2010), s. 103-112.
82. Kovářová, Z. - Chmelař, J. - Šanda, M. - Brynda, J. - Mareš, M. – Řezáčová, P.: Crystallization and diffraction analysis of the serpin IRS-2 from the hard tick *Ixodes ricinus*. *Acta Crystallogr. F* Roč. 66, č. 11 (2010), s. 1453-7.
83. Hoffman, H.E.-Jirásková, J.-Zvelebil, M.-Konvalinka, J.: Random mutagenesis of human serine racemase reveal residues important for the enzymatic activity. *Collect. Czech. Chem. Commun.* Roč. 75, č. 1 (2010), s. 59-79.
84. Nussbaumerová, M. - Srp, J. - Máša, M. - Hradílek, M. - Šanda, M. - Reiniš, M. - Horn, M. - Mareš, M.: Single- and Double-Headed Chemical Probes for Detection of Active Cathepsin D in a Cancer Cell Proteome. *Chembiochem.* Roč. 11, č. 11 (2010), s. 1538-1541.
85. Pressová, M. - Buděšínský, M. - Kóšiová, I. - Kopecký, V. Jr. - Cvačka, J. - Kašička, V. - Šimák, O. - Točík, Z. - Rosenberg, I.: Oligomerization of adenosin-5'-O-ylmethylphosphonate, an isopolar AMP analogue: Evaluation of the route to short oligoadenylates. *Biopolymers.* Roč. 93, č. 3 (2010), s. 277-289.
86. Petrová, M. - Buděšínský, M. - Rosenberg, I.: Straightforward synthesis of 3'-deoxy-3',4'-didehydronucleoside-5'-aldehydes via 2',3'-O-orthoester group elimination: a simple route 3',4'-didehydronucleosides. *Tetrahedron Letters.* Roč. 51, č. 52 (2010), s. 6874-6876.
87. Kovačková, S. - Dračínský, M. – Rejman, D.: The synthesis of piperidine nucleoside analogs - a comparison of several Methods to access the introduction of nucleobases. *Tetrahedron*, doi: 10.1016/j.tet.2010.12.029.
88. Pohl, R. – Rulíšek, L. – Rejman, D.: The stability and reactivity of activated acryloylcarbamates as reagents for the synthesis of N-1 substituted thymine and uracil - an NMR and DFT study. *Journal of Physical Organic Chemistry*, DOI: 10.1002/poc.1775.

89. Košiová, I. – Panova, N. – Buděšínský, M. – Rosenberg, I.: Synthesis of Novel Deoxynucleoside S-methylphosphonic Acids using S-(Diisopropylphosphonomethyl)isothiuronium tosylate, a New Equivalent of Mercaptomethylphosphonate. *Org. Biomol. Chem.*, DOI:10.1039/C0OB00738B.
90. Kočalka, P. - Rejman, D. - Vaněk, V. - Rinnová, M. - Tomečková, I. - Králíková, Š. - Petrová, M. - Páv, O. - Pohl, R. - Buděšínský, M. - Liboska, R. - Točík, Z. - Panova, N. - Votruba, I. - Rosenberg, I.: Structural diversity of nucleoside phosphonic acids as a key factor in the discovery of potent inhibitors of rat T-cell lymphoma thymidine phosphorylase. *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*. Roč. 20, č. 3 (2010), s. 862-865.
91. Rahe, P. - Nimmrich, M. - Schütte, J. - Greuling, A. - Rohlfing, M. - Stará, I. G. - Rybáček, J. - Starý, I. - Kühnle, A. J.: Toward Molecular Nanowires Self-Assembled on an Insulating Substrate: Heptahelicene-2-carboxylic acid on Calcite (10-14). *Phys. Chem. C*. Roč. 114, č. 3 (2010), s. 1547–1552.
92. Songis, O. - Míšek, J. - Schmid, M. B. - Kollárovič, A. - Stará, I. G. - Šaman, D. - Císařová, I. - Starý, I.: A Versatile Synthesis of Functionalized Pentahelices. *J. Org. Chem.* Roč. 75, č. 20 (2010), s. 6889–6899.
93. Prauzner-Bechcicki, J. S. - Godlewski, S. - Budzioch, J. - Goryl, G. - Walczak, L. - Sehnal, P. - Stará, I. G. - Starý, I. - Ample, F. - Joachim, C. - Szymonski, M.: [11]Anthrahelicene on InSb(001) c(8 × 2): A Low-Temperature Scanning Probe Microscopy Study. *ChemPhysChem.*, Roč. 11, č. 16 (2010), s. 3522-3528.
94. Severa, L. - Koval, D. - Novotná, P. - Ončák, M. - Sázelová, P. - Šaman, D. - Slaviček, P. - Urbanová, M. - Kašička, V. - Teplý, F.: Resolution of a configurationally stable [5]helquat. enantiocomposition analysis of a helicene congener by capillary electrophoresis. *New Journal of Chemistry*. Roč. 34, č. 6 (2010), s. 1063-1067.
95. Severa, L. - Adriaenssens, L. - Vávra, J. - Šaman, D. - Císařová, I. - Fiedler, P. - Teplý, F.: Highly modular assembly of cationic helical scaffolds: rapid synthesis of diverse helquats via differential quaternization. *Tetrahedron*. Roč. 66, č. 19 (2010), s. 3537-3552.
96. Vrkoslavová, J. - Demnerová, K. - Macková, M. - Zemanová, T. - Macek, T. - Hajšlová, J. - Pulkrabová, J. - Hrádková, P. - Stiborová, H. : Absorption and translocation of polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) by plants from contaminated sewage sludge. *Chemosphere*. Roč. 81, č. 3 (2010), s. 381-386.
97. Nováková, M. - Macková, M. - Antošová, Z. - Viktorová, J. - Szekeres, M. – Demnerova, K. – Macek, T.: Cloning the bacterial bphC gene into *Nicotiana tabacum* to improve the efficiency of phytoremediation of polychlorinated biphenyls. *Author's view. Bioengineered Bugs* Roč. 1, č. 6 (2010), s. 1-5.
98. Deavers, K. - Macek, T. - Karlson, U.G. - Trapp, S.: Removal of 4-chlorobenzoic acid from spiked hydroponic solution by willow trees (*Salix viminalis*). *Environmental Science and Pollution Research*. Roč. 17, č. 7 (2010), s. 1355-1361.
99. Kamlar, M. - Uhlík, O. - Kohout, L. - Harmatha, J. - Macek, T.: Steroidní fytohormony: funkce, mechanismy účinku, význam. *Chemické listy*. Roč. 104, č. 2 (2010), s. 93-99.
100. Kamlar, M. – Uhlík, O. – Chlubnová, I. – Kohout, L. - Harmatha, J. - Ježek, R. - Šanda, M. - Pišvejcová, A. - Macek, T.: Využití afinitní chromatografie pro studium působení vybraných oxysterolů u rostlin. *Chemické listy*. Roč. 104, č. 2 (2010), s. 215-222.

101. Šťastná, E. – Černý, I. – Pouzar, V. – Chodounská, H.: Stereoselectivity of sodium borohydride reduction of saturated steroidal ketones utilizing conditions of Luche reduction. *Steroids*. Roč. 75: č. 10 (2010), s. 721-725.
102. Dansey, M. V. - Di Chenna, P. H. - Velerio, A. S. - Křištořková, Z. - Chodounská, - H. – Kasal, - A. – Burton, G.: Synthesis and GABA(A) receptor activity of A-homo analogues of neuroactive steroids. *European Journal of Medicinal Chemistry*. Roč. 45, č. 7 (2010), s. 3063-3069.
103. Kovalová, A. – Ledvina, M. – Šaman, D. – Zyka, D. – Kubíčková, M. – Žídek, L. – Sklenář, V. – Pompach, P. – Kavan, D. – Bil, J. – Vaněk, O. – Kubínková, Z. – Libigerová, M. – Ivanova, L. – Antolíková, M. – Mrázek, H. – Rozbeský, D. – Hofbauerova, K. – Kren, V. – Bezouška, K.: Synthetic N-Acetyl-D-glucosamine Based Fully Branched Tetrasaccharide, a Mimetic of the Endogenous Ligand for CD69, Activates CD69(+) Killer Lymphocytes upon Dimerization via a Hydrophilic Flexible Linker. *J. Med. Chem.*, Roč.53 (2010), s. 4050-4065.
104. Dračinský, M. – Pohl, R. – Slavětinská, L. – Buděšinský, M.: Observed and calculated <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C chemical shifts induced by the in situ oxidation of model sulfides to sulfoxides and sulfones. *Magn.Reson.Chem.*, Roč. 48 (2010), s. 718-726.
105. Dračinský, M. – Bouř, P.: Computational Analysis of Solvent Effects in NMR Spectroscopy. *J.Chem.Theory Comput.* Roč. 6 (2010) s. 288-299.
106. Ehala, S. – Grishina, A. A. – Sheshenev, A. E. – Lyapkalo, I. M. – Kašička, V.: Determination of acid-base dissociation constants of very weak zwitterionic heterocyclic bases by capillary zone electrophoresis. *Journal of Chromatography A*. Roč. 1217, č. 51 (2010). s. 8048-8053.
107. Ehala, S. – Makrlík, E. – Toman, P. – Kašička, V.: ACE applied to the quantitative characterization of benzo-18-crown-6-ether binding with alkali metal ions in a methanol-water solvent system. *Electrophoresis*. Roč. 31 (2010), s. 702-708.
108. Vrkoslav, V. - Muck, A. - Cvačka, J. - Svatoš, A.: MALDI Imaging of Neutral Cuticular Lipids in Insects and Plants. *Journal of The American Society for Mass Spectrometry*. Roč. 21, č. 2 (2010), s. 220-231.
109. Vrkoslav, V. - Urbanová, K. - Cvačka, J.: Analysis of wax ester molecular species by high performance liquid chromatography/atmospheric pressure chemical ionisation mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. Roč. 1217, č. 25 (2010), s. 4184–4194.

## 6. Popularizační a propagační činnost

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupořadatel	6 Datum a místo konání
1	<b>Dny otevřených dveří 2010</b>	501 návštěvníků (školy i veřejnost), 93 zúčastněných pracovníků (exkurze+výklady v laboratořích)		4.– 6. 11. 2010 ÚOCHB
2	Výstava „Průsečíky a rovnoběžky“	Zjednodušená expozice ÚOCHB ze Šanghaje	Geofyzikální ústav AV ČR	3.– 30.11. 2010 NTK
3	Rozhovory, články v médiích	Více než 20 rozhovorů a článků v rozhlase, televizi a tisku	média	Průběžně v roce 2010
4	Natáčení filmů	1 díl cyklu Vizita, 1 díl cyklu O vědě a vědcích	ČT1, Nova, Barrandov	Průběžně v roce 2010
5	Demonstrace	Demonstrace zařízení pro kapilární a průtokové elektromigrační metody studentům Matematicko-fyzikální fakulty UK, obor biofyzika	ÚOCHB AVČR	12. 5. 2010 Laboratoř elektromigračních metod
6	<b>EXPO 2010 Šanghaj</b>	Expozice ÚOCHB „Molecules for life“ (léky proti HIV), viz obrázek	KGK ČR	1.– 31.10. 2010 Šanghaj



EXPO Šanghaj 2010 „Molecules for life“

#### **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, analýza chemického a biologického materiálu a speciální měření chemických a biologických vlastností
- výroba, instalace a opravy elektrických, elektronických a mechanických přístrojů a zařízení.

V roce 2010 činil celkový rozsah jiné činnosti 0,71% 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 2010 bylo v ÚOCHB provedeno několik externích kontrol.

1/ Audity čtyř projektů z rozpočtu EU, a to tří projektů 7. rámcového programu a jednoho ERC Advance projektu. Nedostatky nebyly zjištěny.

2/ Kontrola hospodaření s veřejnými prostředky provedená MŠMT ČR, jejímž předmětem bylo čerpání a využití podpory na výzkum a vývoj, správné vykazování čerpání uznaných nákladů podle Smlouvy/Rozhodnutí a úplná dokumentace k oponenturám u veškerých projektů poskytovatele MŠMT ČR řešených v roce 2009. Dvěma řešitelům bylo uloženo vypracovat novou tabulku uznaných nákladů a přesněji členit jednotlivé uznané náklady ve formuláři položek uznaných nákladů.

V závěru kontrolní zprávy je konstatováno, že kontrola čerpání dotací ze státního rozpočtu na vybrané projekty výzkumu a vývoje prokázala, že dotace v roce 2009 byly čerpány na účel, na který byly poskytnuty a v souladu s časovým určením.

Všechny položky čerpání byly u kontrolovaných projektů řádně zaúčtovány v souladu s účetním rozvrhem. U všech projektů, ve kterých byly zapojeny smluvně nebo rozhodnutím vlastní či zahraniční zdroje, bylo správně postupováno podle §8 odstavce 1 zákona č. 130/2002 Sb., uznané náklady sledovány odděleně, včetně vlastních i zahraničních zdrojů. Během kontroly účetních dokladů z hlediska dodržování předepsaných formálních náležitostí účetních dokladů nebyly zjištěny nedostatky při dodržování zákona č. 320/2001 Sb. Závažné nedostatky při administraci projektů výzkumu a vývoje nebyly shledány.

3/ Kontrola provedená Pražskou správou sociálního zabezpečení za období od 1.9.2008 do 31.8.2010 ve věci plnění pojistného, plnění povinností v nemocenském pojištění a důchodovém pojištění. Bylo konstatováno, že účetní jednotka postupuje systémově správně, nápravné opatření nebylo uloženo.



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

Kromě dotací od zřizovatele a finančních prostředků od poskytovatelů grantů jsou hlavním zdrojem finančních příjmů ústavu licenční poplatky od firmy Gilead Sciences. Objem finančních zdrojů z licenčních příjmů má (v USD) stoupající tendenci a tato tendence se podle vyjádření zástupců firmy Gilead očekává i v blízké budoucnosti. Finanční situaci pozitivně ovlivnilo zavedení látky tenofovir pro léčení žloutenky typu B. V různých fázích klinických testů jsou i preparáty proti papilomavirum a další preparát proti HIV. Na všechny tyto láky vlastní ústav základní patenty licencované firmě Gilead Sciences. Ústav má dále smlouvu se spin-off Okapi Sciences společností v Belgii a získává spoluúcast 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 ÚOCHB dceřinná 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, a pod. Tato společnost je kontrolována dozorčí radou ve složení Mgr. Tomáš Kraus, PhD., Ing. David Šaman, CSc. a paní Božena Petschová. Výkonným ředitelem společnosti je doc. Ing. Martin Fusek, CSc. Ekonomické efekty se očekávají v oblasti medicínální chemie v horizontu do deseti let.

**Ústav realizuje kompletní rekonstrukci 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 finanční náklady nad 1 miliardu Kč, hrazené převážně z licenčních příjmů. První fáze rekonstrukcí, oprava budovy C, započala v červenci 2010. Na dostavbu budovy D a rekonstrukci budovy A je vydáno pravomocné územní rozhodnutí s předpokladem zahájení prací v říjnu 2011.**

## 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), nově vytvořené (počátkem roku 2007) vědecké a vědecko-servisní týmy se řídí původním pracovním plánem schváleným na pětileté období, do termínu dalších evaluací v roce 2011. Předpokládaná činnost v tomto pětiletém období je tedy z velké části definována přijatým plánem.

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

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

předepsaným včetně hlášení o výsledcích práce.

**V týmu organických syntéz pro biomedicínské aplikace** bude výzkum zaměřen na oblast modifikovaných nukleobází, nukleosidů, nukleotidů a nukleových kyselin pro aplikace ve farmakochemii, bioanalýze a chemické biologii. Dále

- bude pokračovat studium modifikovaných purinových nukleosidů jako potenciálních terapeutik hepatitidy C,
- budou připraveny další nukleotidové stavební bloky označené na nukleobázi vhodnou elektrochemicky aktivní značkou a po zabudování do oligonukleotidů budou tyto využity jako potenciální sensory hybridizace DNA, obdobně označené oligonukleotidy budou využity k zakotvení na površích kovu a elektrod a využity pro studium přenosu náboje v DNA,
- budou připraveny nové typy C-nukleosidů nesoucích modifikované nukleobáze, případně jejich trifosfáty a bude studována jejich enzymatická inkorporace do DNA polymerasami; výsledky budou využity v racionálním návrhu umělých párů bází pro rozšíření genetické abecedy,
- budou konstruovány funkcionalizované DNA duplexy pomocí PCR inkorporace modifikovaných dNTP.

**V týmu biochemie proteinů** bude pokračovat studium inhibitorů virové proteasy HIV a vývoje resistance vůči nim u pacientů s AIDS, na charakterizaci glutamátcarboxypeptidasy II a jejich homologů a orthologů jako cíle terapeutického zásahu při onemocněních CNS a v onkologii, na studium struktury a aktivity serinové racemasy z myšího a lidského mozku. Dále

- bude strukturně charakterisována rekombinantní lidská GCPII i její homolog GCPIII v komplexu se specifickými inhibitory, budou připraveny monoklonální protilátky proti těmto enzymům a charakterisována jejich exprese v lidských i zvířecích tkáních.
- Bude provedena strukturně-funkční studie C-terminální domény retrovirové proteasy, která ovlivňuje skládání a infektivitu opičího viru. Budou identifikovány buněčné proteiny, které s touto doménou interagují a bude provedena strukturně funkční analýza matrixového proteinu opičího viru.

#### **V chemii steroidů**

- V oblasti neurosteroidů budou připraveny nové typy neuroaktivních steroidů se zlepšenou metabolickou stabilitou a s dostatečnou rozpustností ve vodě,
- v oblasti brassinosteroidů budou pokračovat syntézy nových brassinosteroidů navržených na základě molekulového modelování, jako jsou například konjugáty s aminokyselinami a alfa-hydroxykyselinami, fluorované brassinosteroidy a dále jak přírodní tak nové syntetické brassinosteroidy s modifikovaným postranním skeletem,
- v oblasti suprasteroidů bude hlavní pozornost věnována oligoTB systémům se steroidní substitucí a selektivní epoxidací steroidních olefinů a syntetizovány další synthony pro konstrukce supramolekul.

#### **V oblasti přírodních látek**

- Bude pokračovat studium biosyntézy feromonů čmeláků v labiální žláze s cílem rozhodnout mezi možnostmi biosyntézy *de novo* a možností participace zásobních tuků jako přímých prekursorů, bude studováno rozšíření čmeláků v ČR za pomoci chemotaxonomických i genetických technik s cílem sledování biodiversity a jejich změn.
- Bude studována chemická komunikace termitů a typy signálů, které se uplatňují mezi kastami v kolonii termitů,
- bude pokračovat studium peptidických regulátorů metamorfozy, reprodukce a imunity hmyzu, včetně identifikace nových hmyzích peptidů s antimikrobiálními účinky a syntézy analogů.
- bude pokračovat výzkum enzymových transformací rostlinných olejů v superkritickém oxidu uhličitém v rámci národních (GACR) i mezinárodních (COST) projektů.

**V oblasti organické chemie** bude pozornost soustředěna na vývoj obecné

asymetrické syntézy helicenů a heterohelicenů, aby tyto látky byly dostupné v dostatečném množství v neracemické formě pro další aplikace v asymetrické katalýze a molekulární elektronice. Dále

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

- budou syntetizovány isoprenoidy v racemické a neracemické formě za použití nástrojů organometalické chemie a využití [2+2+2] cykloisomerizace pro přípravu funkcionalizovaných arylpurinových nukleotidů a nukleosidů,

- bude zahájena syntéza potenciálně vodivých oligomerních derivátů umožňujících selektivní interakce s partnerským řetězcem na bázi donor-akceptorových interakcí,

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

### **V oblasti biologické chemie**

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

- budou studovány interakce heptaoligodeoxynukleotidů s CpG motivem modifikovaných v internukleotidové vazbě s TL9 receptorem,

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

- budou vypracovány high-throughput testy na screening potenciálních inhibitorů nukleosidfosforylas a 5'-nukleotidas,

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

- budou připraveny nové inhibitory lidské BHMT a určeny jejich aktivity in vitro a in vivo,

- budou připraveny nové inhibitory bakteriálních aminopeptidáz 1 a 2 a určeny jejich aktivity in vitro,

- budou připraveny nové analogy lidského insulínu a určeny jejich aktivity in vitro a in vivo, případně krystalové struktury,

- budou pokračovat 2DE proteomické studie buněk z normální a rakovinné tkáně prsu,

- budou pokračovat proteomické studie antimikrobiálních látek larev masařky,

- budou připraveny nové inhibitory bakteriálních DapE a ArgE enzymů.

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

- bude pokračovat design a syntéza polykationických transportních systémů negativně nabitých terapeutik typu modifikovaných nukleotidů a oligonukleotidů a vektoru DNA plasmidu pro genovou terapii,

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

**V oblasti molekulového modelování** budou rozvíjeny tyto okruhy aktivit:

- Studium modelových systémů a bazí DNA v elektronicky excitovaných stavech, vývoj

hybridních QM/MM metod a aplikace na interakci DNA a proteinu, interakce analogů  
bází DNA, struktura a sbalování proteinů, struktura a dynamika peptidů,  
- výpočet termodynamických charakteristik DNA a proteinů s interagujícími systémy,  
studium energetiky a dynamiky nekanonických párůází v DNA a RNA,  
- studium interakce malých molekul s kationtovými centry v komplexních systémech a  
studium konformačního prostoru nukleových kyselin,  
- QM/MM a QM/MD simulace štěpení fosfodiesterové vazby v RNA (ribozomy),  
- studium segregace iontů na površích a iontové párování i afinita iontů k proteinum a  
k membránám,  
- studium struktury a dynamiky solvatovaných elektronů,  
- studium reakčních mechanismů metaloproteinů,  
- molekulový design peptidů vázajících vybrané ionty kovů,  
- výpočet relativistických efektů u organických biradikalů,  
- výpočty reaktivity karboranových ylidů a návrhy struktur materiálů pro fotovoltaické  
články,

- studium stability párů nukleových kyselin v nevodných prostředích

**V oblasti strukturní analýzy** budou vyvíjeny nové metody analýzy organických látek s  
využitím chromatografických separačních technik a hmotnostní spektrometrie.

Pozornost bude věnována přírodním látkám lipidického charakteru a látkám s  
biologickou aktivitou. Bude pokračovat vývoj softwarových nástrojů pro interpretaci MS  
spekter. Bude pokračovat zavádění technik analýzy proteinů a peptidů, zejména jejich  
purifikace a kvantifikace. V rámci servisních povinností budou rutinně analyzovány  
vzorky syntetických i přírodních látek. Standardně budou měřena MS spektra při  
jednotkovém nebo vysokém rozlišení s využitím EI, ESI, APCI, FAB a MALDI ionizace.  
V případě potřeby budou prováděny GC/MS a LC/MS analýzy.

Budou nadále řešeny základní problémy konformace biopolymerů pomocí chirální  
spektroskopie (proteiny, peptidy, nukleové kyseliny, sacharidy). V detailu budeme  
řešit konformaci disulfidových můstků, amidového chromoforu, vlivu prostředí na  
spektra. Budeme nadále rozvíjet chirální spektroskopii po teoretické i experimentální  
stránce. Budeme rovněž poskytovat celoustravní servis v oboru CD, IR.

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

- vývoj nových metod pro určení absolutních konfigurací u biologicky významných  
látek pomocí *in situ* reakcí v NMR kyvetách a teoretických výpočtů chemických posunů  
a interakčních konstant pomocí *ab initio* metod (modifikované peptidy a nukleotidy),  
zavádění měření NMR spekter v pevné fázi a samoobslužné měření NMR spekter na  
přístroji Bruker AVANCE-400 s automatickým měničem vzorku a naprogramovanými  
NMR experimenty,

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

**Společná laboratoř ÚOCHB a VŠCHT Praha** se bude věnovat studiu regulačního  
efektu oxysteroidů na aktivitu zejména fotosyntetických enzymů RuBisCO, OEC  
(oxygen evolving complex), ATP synthasy a na aktivitu glutathion-S-transferasy (GST).  
Zvýšená pozornost bude věnována ko-krystalizaci oxysteroidních ligandů s RuBisCO a  
X-ray difrakční analýze připravených krystalů, což umožní charakterizovat vazebné  
místo oxysteroidu a další výzkum založený na molekulárním modelování.

V rámci studia biologického odstraňování toxických látek ze životního prostředí budou  
identifikovány další produkty degradace PCB rostlinami, zejména ve srovnání  
s geneticky modifikovaným materiálem nesoucím degradační geny mikrobiálního

původu. Jako modelová rostlina je použit tabák a len. Změny efektivity bioremediace v rhizosférní oblasti rostlin vlivem selekce účinných mikrobiálních konsorcií budou sledovány v souvislosti s projektem „Metagenome Studies in Bioremediation“ jako změny v mikrobiální diversitě v závislosti na přítomnosti vybraných sekundárních metabolitů rostlin.

**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. Aktivity 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. Aktivity v oblasti pracovněprávních vztahů: \*)**

V r. 2010 byli v souladu s Kariérním řádem atestováni vysokoškolsky vzdělaní pracovníci ve vědeckých a vědecko-servisních týmech, kteří byli přeřazeni po obhájení disertační práce do vyššího kvalifikačního stupně a pracovníci, kterým v tomto období končila platnost pracovních smluv. S ohledem na výsledky atestací jsou s těmito zaměstnanci uzavřeny pracovní smlouvy na dobu určitou (1 – 5 let). Úsilí vedení

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

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

razítko

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE A BIOCHEMIE  
AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY, v.v.i.  
Flemingovo nám. 2, 163 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**

**Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR v roce 2010 a hlavní dosažené výsledky**  
**II. Číselná část**

<b>Zkratka pracoviště</b>	ÚOCHB
<b>Identifikační číslo (IČ)</b>	61388963

**1. Vědečtí pracovníci, DSP, spolupráce s VŠ, vzdělávání**

1) <b>Forma vědeckého vzdělávání</b>	Počet absolventů v r. 2010	Počet doktorandů k 31.12.2010
Doktorandi (studenti DSP) v prezenční formě studia	6	100
Doktorandi (studenti DSP) v kombinované a distanční formě studia	10	22
<b>C e l k e m</b>	16	122
z toho počet doktorandů ze zahraničí	0	23

2) <b>Forma výchovy studentů pregraduálního studia</b>	
Celkový počet diplomantů	60
Počet pregraduálních studentů podílejících se na vědecké činnosti ústavu	28

3) <b>Vědecké a vědecko-pedagogické hodnosti pracovníků ústavu</b>	Věd. hodnost nebo titul		Vědecko-pedagog. hodnost	
	DrSc., DSc.	CSc., Ph.D.	profesor	docent
Počet k 31.12.2010	13	167	7	10
z toho uděleno v roce 2010	1	12	1	0

4) <b>Pedagogická činnost pracovníků ústavu</b>	Letní semestr 2009/10
Celkový počet odpřednášených hodin na VŠ v programech bakalářských/magisterských/doktorských	697
Počet semestrálních cyklů přednášek/seminářů/cvičení v bakalářských programech	8
Počet semestrálních cyklů přednášek/seminářů/cvičení v magisterských programech	38
Počet pracovníků ústavu působících na VŠ v programech bakalářských/magisterských/doktorských	29

## 2. Vědečtí pracovníci, DSP, spolupráce s VŠ, vzdělávání

pokračování 1

ÚOCHB

5) <b>Vzdělávání středoškolské mládeže</b>	Školní rok	
	2009/10	2010/11
Počet odpřednášených hodin	602	522
Počet vypracovaných prací	4	1
Počet organizovaných/spoluorganizovaných soutěží	2	3

6) <b>Spolupráce ústavu s VŠ ve výzkumu</b>	Pracoviště AV příjemcem	Pracoviště AV spolupříjemcem
	Počet projektů a grantů, řešených v r. 2010 společně s VŠ (včetně grantů GA ČR a GA AV)	25 (10/2/13)
Počet pracovníků VŠ, kteří mají v ústavu pracovní úvazek	6	6
Počet pracovníků ústavu, kteří mají na VŠ pracovní úvazek	18	2

### **K oddílu 1:**

1. a 2. řádek: *uvádí se i studenti DSP, kteří se v ústavu školí (školitel je pracovníkem ústavu), třebaže proces akreditace tohoto programu pro ústav AV ČR nebyl dosud dokončen*

### **K oddílu 2:**

1. řádek: *uvádí se celkový počet diplomantů, kteří během roku měli vedoucího práce z ústavu AV ČR*  
2. řádek: *uvádí se celkový počet bakalářů, kteří během roku měli vedoucího práce z ústavu AV ČR*

### **K oddílu 3:**

1. řádek: *uvádí se celkový počet fyzických osob v hlavním pracovním poměru (včetně pracovníků zaměstnaných na částečný úvazek)*

### **K oddílu 4:**

1., 2. a 3. řádek: *uvádí se celkový počet odpřednášených hodin, příp. počet cyklů na všech vysokých školách dohromady podle studijního programu (ve tvaru např. 0/10/20), ale pouze u těch vyučujících, kteří mají hlavní pracovní poměr v AV ČR,*  
4. řádek: *uvádí se počet pracovníků bez ohledu na rozsah úvazku v AV ČR*

### **K oddílu 6:**

1. řádek: *n e z a h r n u j í s e stipendia na zahraniční pobyty, granty určené pouze na nákup techniky, literatury apod. počty vedře v členění GAČR/GAAVČR/programový projekt*



### 3. Vědeční pracovníci, DSP, spolupráce s VŠ, vzdělávání

pokračování 2

ÚOCHB

#### 7) Společná pracoviště ústavu s účastí VŠ

Název společného pracoviště	Počet pracovníků	
	ryz. p.d.	prum. prep.
<b>LC512 - Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů</b>		
Počet participujících pracovníků z ústavu	68	24,50
Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť	8	13,30
<b>LC531 - Centrum molekulární biologie a fyziologie společenstev kvasinek</b>		
Počet participujících pracovníků z ústavu	8	4,15
Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť	41/17	14.4/7.85
<b>LC06077 - Centrum chemické genetiky</b>		
Počet participujících pracovníků z ústavu	28	36,42
Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť	38	34,81
<b>LC06061 - Centrum buněčné invazivity v embryonálním vývoji a metastázách nádorů</b>		
Počet participujících pracovníků z ústavu	7	42,85
Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť	29	20,68
<b>1M0508 - Nová antivirotika a antineoplastika</b>		
Počet participujících pracovníků z ústavu	61	50,71
Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť	30	50,20
<b>1M06030 - Funkční genomika a proteomika ve šlechtění rostlin</b>		
Počet participujících pracovníků z ústavu	12	5,95
Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť	90	41,75
<b>Smlouva - Společná laboratoř ÚOCHB - VŠCHT</b>		
Počet participujících pracovníků z ústavu	16	9,62
Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť	17	8,20

**Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR v roce 2010 a hlavní dosažené výsledky**  
**II. Číselná část**

<b>Zkratka pracoviště</b>	ÚOCHB
---------------------------	-------

**4. Mezinárodní vědecká spolupráce**

1. Počet konferencí s účastí zahraničních vědců (pracoviště jako pořadatel nebo spolupořadatel)	
2. Počet zahraničních cest vědeckých pracovníků ústavu	392
2a/ z toho mimo rámec dvoustranných dohod AV ČR	388
3. Počet aktivních účastí pracovníků ústavu na mezinárodních konferencích	188
3a/ Počet přednášek přednesených na těchto konferencích	26
3b/ z toho zvané přednášky	20
3c/ Počet posterů	195
4. Počet přednášejících na zahraničních univerzitách	17
5. Počet členství v redakčních radách mezinárodních časopisů	23
6. Počet členství v orgánech mezinárodních vědeckých vládních a nevládních organizací (společnosti, komitěty)	5
7. Počet přednášek zahraničních hostů v ústavu	43
8. Počet grantů a projektů financovaných ze zahraničí	12
8a/ z toho z programů EU	9

*k bodu 4: započítávají se semestrální nebo delší kursy nebo jim rovnocenné ucelené bloky přednášek; nezapočítávají se jednotlivé izolované přednášky (semináře) v rámci návštěv*

*k bodu 5: počítá se každé členství v redakční radě u každého pracovníka ústavu*

*k bodu 6: počítá se každé členství pracovníka ústavu ve výboru nebo podobném orgánu mezinárodní vědecké organizace*

*k bodu 8: započítávají se granty a výzkumné projekty vypsané zahraničními nebo mezinárodními (např. EU) agenturami a firmami*

## Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR v roce 2009 a hlavní dosažené výsledky

### II. Číselná část

Zkratka pracoviště	ÚOCHB
--------------------	-------

ÚOCHB pokračování

#### 5. Projekty programů EU řešené na pracovišti v roce 2010<sup>1)</sup>

#### Projekty programů EU řešené na pracovišti v roce 2010<sup>1)</sup>

Název projektu	Akronym	Číslo projektu a identifikační kód <sup>2)</sup>	Typ <sup>3)</sup>	Koordinátor <sup>4)</sup>	Řešitel <sup>5)</sup>	Kontr. částka v EURO <sup>6)</sup>	Rok ukončení
Regular Arrays of Artificial Surface - Mounted Dipolar Molecular Rotors	DIPOLAR ROTOR ARRAY	227756/ERC-2008-AdG	Support for frontier research	ÚOCHB AV ČR, v.v.i., Česká republika	Josef Michl	321 407	2014
New Horizons for Mass Spectrometry	HORIZOMS	226373/ERC-2008-AdG	Support for frontier research	ÚOCHB AV ČR, v.v.i., Česká republika	Detlef Schröder	133 306	2014
System biology of Mycobacterium tuberculosis	SystemTb	241587/ FP7-HEALTH-2009-two-stage	CP	Fundacio Privada CRG, Spain	Iva Pichová	42 899	2014
Development of Diamond Intracellular Nanoprobes for Oncogen Transformation Dynamics Monitoring in Living Cells	DINAMO	245122/ FP7-KBBE-2009-3	CP	Interuniversitair Micro-electronica Centrum vzw, Belgie	Miroslav Ledvina	1 525	2013
Multi-scale Formation of Functional Nanocrystal-Molecule Assemblies and Architectures	FUNMOL	213382/ FP7-NMP-2007-SMALL-1	CP	TNI-UCC, Ireland	Ivo Starý	103 707	2011
Targeting assembly of infectious HIV particles	HIV ACE	201095/ FP7-HEALTH-2007-A	CP	INSERM, France	Jan Konvalinka	129 988	2011
Targeting HIV Integration co-factors, targeting cellular proteins during nuclear import or integration of HIV	THINC	201032/ FP7-HEALTH-2007-A	CP	Katholieke Universiteit, Leuven, Belgium	Pavčina Řezáčová	100 329	2012
Effects of temperature, dynamics, and media on magnetic resonance parameters in endohedral fullerenes and confined Xe atom systems.	MRTDM	230955/ FP7-PEOPLE-ERG-2008	Marie Curie ERG	ÚOCHB AV ČR, v.v.i., Česká republika	Michal Straka	16 565	2011
HIV protease inhibitor resistance by enzyme-substrate coevolution	HIV PI resistance	037693/FP6-2005-LIFESCIHEALTH-6	STREP	Universitätsklinikum Heidelberg, Germany	Jan Konvalinka	17 126	2010

866 852

1) uveďte projekty komunitárních programů (Rámcové programy včetně Euratomu, Kultura 2007, Media 2007, Galileo, CIP, Grundtvig, Leonardo, atd.) a projekty jednotlivých ředitelství EK. Neuvádějte mezinárodní mnohostranné i bilaterální programy a programy typu COST, EUREKA či KONTAKT (viz část 5 textové části)

2) uveďte číslo projektu včetně identifikace programu (např. FP7-ABC-2007-1-111111, DG INFOS-1111)

3) např. CP, NoE, CSA, STREP, IP, SSA, CA, Marie Curie, I3, SME (MSP), EURATOM

4) uveďte instituci, zemi (např. Royal Veterinary and Agricultural University, Frederiksberg, Denmark)

5) uveďte jméno řešitele z pracoviště AV ČR odpovědného za projekt

6) odhad finančního podílu připadající na pracoviště na rok 2010

**Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR v roce 2010 a hlavní dosažené výsledky**  
**II. Číselná část**

**Zkratka pracoviště** ÚOCHB

ÚOCHB pokračování

**6. Projekty financované ze strukturálních fondů EU podané za pracoviště v roce 2010<sup>1)</sup>**

**Projekty financované ze strukturálních fondů EU podané za pracoviště v roce 2010<sup>1)</sup>**

Název projektu	Registrační číslo	Operační program	Stav projektu <sup>2)</sup>	Manažer <sup>3)</sup>	Kontr.celková částka	Kontr. částka v 2010 <sup>4)</sup>	Rok zahájení	Rok ukončení
Centrum molekulárních interakcí v biomedicině	CZ.2.16/3.1.00/24016	CZ.2.16 OP Praha Konkurenceschopnost	schválen	Iva Pichová	60 532 tis. Kč	0	2010	2012

1) uveďte zahájené i nově podané (i neúspěšné) projekty strukturálních fondů  
 2) uveďte, zda byl projekt schválen, zamítnut nebo zda se projednává  
 3) uveďte jméno odpovědného manažera za pracoviště  
 4) odhad finančního podílu čerpaného pracovištěm v roce 2010

**Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR v roce 2010  
a hlavní dosažené výsledky  
II. Číselná část**

<b>Zkratka pracoviště</b>	ÚOCHB
---------------------------	-------

**7. Počty patentů, užitných vzorů, vynálezů, licenčních smluv  
a ochranných známek v AV ČR v roce 2010**

	do 2009	2010
1. Patenty udělené v ČR, platné	18	28
1.a v zahraničí, platné	42	44
2. Zapsané užitné vzory	1	1
2.a Přihlášky užitných vzorů	0	0
3. Přihlášky vynálezů CZ a zahr.	9 a 15	7 a 4
4. Platné licenční smlouvy	4	4
5. Ochranné známky	0	0

*Případné dotazy k vyplnění pouze této tabulky zodpoví Mgr. Martin Podrápský,  
Právní odbor SSČ AV ČR, tel.: 221 403 528, e-mail: podrapsky@ssc.cas.cz*



**Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR v roce 2010  
a hlavní dosažené výsledky  
II. Číselná část**

<b>Zkratka pracoviště</b>	ÚOCHB
---------------------------	-------

<b>9. Číselnou část vyplnil</b>	
Jméno	RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.
Telefon	220 183 333
e-mail	<a href="mailto:havlas@uochb.cas.cz">havlas@uochb.cas.cz</a>
Datum	26. května 2011