

ROČNÍK 31 (2003), ČÍSLO 2

Bulletin



2

**ČESKÁ SPOLEČNOST PRO
BIOCHEMII A MOLEKULÁRNÍ BIOLOGII**



ISSN 1211-2526

BULLETIN

ČESKÉ SPOLEČNOSTI PRO BIOCHEMII A MOLEKULÁRNÍ BIOLOGII

<http://CSBMB.img.cas.cz>

TOMISLAV BARTH - VÝKONNÝ REDAKTOR

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6
<barth@uochb.cas.cz>

IRENA KRUMLOVÁ- ZÁSTUPCE VÝKONNÉHO REDAKTORA

Česká společnost pro biochemii a molekulární biologii, Kladenská 48,
160 00 Praha 6, tel. 235 360 057

nebo Ústav biochemie a mikrobiologie VŠCHT, 166 28 Praha 6, Technická 5
tel.: 224 355 166, fax: 224 355 167, e-mail <irena.krumlova@vscht.cz>

REDAKČNÍ RADA

T. Barth, J. Barthová, J. Duchoň, I. Krumlová, V. Kašička

Příspěvky na disketě 3,5“; zpracované v textovém procesoru Word, zasílejte, spolu s vytištěným textem, kterémukoli z redaktorů nebo do sekretariátu společnosti. Prosíme, abyste do textu nemontovali ani obrázky, ani tabulky. Připojte je v originále, případně na disketě ve zvláštních souborech, v textu označte, prosím, jen jejich umístění.

**Adresa ČSBMB: Kladenská 48, 160 00 Praha 6
tel.: 235 360 057 – záznamník**

ISSN 1211-2526

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

<http://CSBMB.img.cas.cz>

SDĚLENÍ SPOLEČNOSTI

Stanovy České společnosti pro Biochemii a Molekulární biologii	36
G. Entlicher: 50 let katedry biochemie přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy	43
M. Tichá: Odborná činnost pracovníků katedry biochemie Přírodovědecké fakulty UK	45
K. Huml, J. Vondráček: Počítačové modelování molekul metodami molekulární mechaniky	50

ZPRÁVY ZE SEKČÍ

Peptidová sekce

J. Slaninová: VIIIth Conference on Biol. Active Peptides, Prague, 23rd – 25th April 2003	54
---	----

Sekce separačních metod

V. Kašička: Zpráva o sympoziu Separations in the Biosciences-SBS 2003	56
---	----

RŮZNÉ

Statut Komise pro etiku vědecké práce Akademie věd ČR	59
FEBS Advanced Course – Kyjev	61
Central European Science Journals	63

STANOVY ČESKÉ SPOLEČNOSTI PRO BIOCHEMIÍ A MOLEKULÁRNÍ BIOLOGIÍ

Článek 1

Základní ustanovení

- (1) Česká společnost pro biochemii a molekulární biologii (dále jen ČSBMB) je profesní dobrovolná organizace fyzických osob s orientací na biochemii, molekulární biologii a příbuzné obory.
- (2) ČSBMB je sdružením podle zákona č. 83/1990 Sb. o sdružování občanů.
- (3) ČSBMB má právní subjektivitu.
- (4) Sídlem ČSBMB je Praha.
- (5) ČSBMB působí na celém území České republiky.
- (6) ČSBMB koordinuje svoji činnost s činností Federace evropských biochemických společností, jejímž je členem, a spolupracuje úzce s Mezinárodní unií pro biochemii a molekulární biologii.
- (5) Poskytuje svým členům fórum pro diskuse, výměnu názorů a zkušeností.
- (6) Přispívá ke zvyšování odborné úrovně svých členů, kteří začínají v oboru pracovat.
- (7) Spolupracuje se zahraničními společnostmi odborného zaměření, zejména úzce spolupracuje a svou činnost koordinuje s oborově příbuznými slovenskými společnostmi a napomáhá kontaktu svých členů se zahraničními pracovišti.
- (8) Vyjadřuje se k odbornému názvosloví.
- (9) Spolupracuje při zvyšování úrovně výuky v oboru biochemie, molekulární biologie a příbuzných oborů na školách všech stupňů.

Článek 2

Úkoly ČSBMB

- (1) Podporuje rozvoj oborů biochemie, molekulární biologie a příbuzných oborů podněcováním vědecké a vědecko-popularizační činnosti a šířením nových poznatků do praxe.
- (2) Orientuje zájem členů na řešení významných otázek oboru.
- (3) Rozvíjí prognostickou činnost a anticipuje vývoj oborů.
- (4) Organizuje, prohlubuje a koordinuje spolupráci svých členů působících v různých institucích, ve vědě a praxi.
- (1) Pořádá vědecké a pracovní konference, kongresy, výroční sjezdy, přednášky, diskuse, semináře, kurzy apod.
- (2) Vyjadřuje se k vědecké a publikační činnosti v oboru a iniciativně se podílí na publikační praxi a na provádění ediční politiky v oboru biochemie a molekulární biologie.
- (3) Zpracovává expertízy, odborná posouzení a prognosy pro orgány všech stupňů.
- (4) Vyhláší soutěže a uděluje ceny za významné výsledky.
- (5) Je oprávněna vydávat časopis a pro své potřeby publikace mající vztah k činnosti ČSBMB.

Článek 3

Formy činnosti

Článek 4

- (1) ČSBMB se člení na pobočky a na sekce, v nichž se soustřeďuje činnost jejich členů.
- (2) Pobočky jsou zřizovány podle územního principu v místech, kde jsou pro jejich činnost předpoklady. Sdružují členy ČSBMB, zejména ve významných vědeckých, pedagogických nebo průmyslových centrech.
- (3) Sekce jsou zřizovány podle odborného zaměření členů ČSBMB. Sdružují členy ČSBMB podle jejich odborného zájmu.

Článek 5 Členství

- (1) Členství je individuální nebo kolektivní.
- (2) Členství individuální může být též členství čestné.

Individuální členství:

- (3) Členem se může stát vědecký, vědeckopedagogický, vědeckotechnický, odborný pracovník nebo student pregraduální a postgraduální působící v oboru biochemie a molekulární biologie nebo v oborech s biochemií a molekulární biologii bezprostředně souvisejících, jestliže se písemně přihlásí za člena a prohlásí, že souhlasí s posláním a s úkoly ČSBMB a zaváže se přispívat k jejich plnění.
- (4) Členství vzniká přijetím za člena a zaplacením členských příspěvků na jeden rok. O přijetí rozhoduje výbor ČSBMB s konečnou platností.

Kolektivní členství:

- (5) Kolektivním členem se může stát právnická osoba mající sídlo nebo registrované zastoupení na území České republiky, projeví-li zájem o kolektivní členství podáním písemné přihlášky.
- (6) Součástí přihlášky za kolektivního člena je písemný návrh smlouvy specifikující

jíci za jakých podmínek a jakou formou se hodlá na činnosti ČSBMB podílet.

- (7) Právnická osoba v přihlášce uvede jednoho pracovníka, který bude zmocněn ji zastupovat v záležitostech souvisejících s kolektivním členstvím a jednat jejím jménem.
- (8) Členství vzniká přijetím za kolektivního člena. O přijetí rozhoduje výbor ČSBMB s konečnou platností.

Čestné členství:

- (9) Čestným členem ČSBMB se může stát významný domácí nebo zahraniční vědecký, vědeckopedagogický nebo odborný pracovník působící v oboru biochemie a molekulární biologie.
- (10) Čestné členství uděluje výbor ČSBMB na návrh kteréhokoliv člena společnosti.
- (11) Čestný člen je zbaven povinnosti platit členské příspěvky ČSBMB po dobu trvání jeho členství ve společnosti.

Článek 6

Práva a povinnosti člena

- (1) Členovi přísluší právo:
 - a) Podílet se na odborné činnosti v místně příslušné pobočce.
 - b) Účastnit se činnosti v sekcích.
 - c) Zúčastnit se valného shromáždění a podílet se na jeho jednání.
 - d) Volit a být volen do všech orgánů ČSBMB
 - e) Být členem komisí, pracovních skupin, delegací apod., vytvářených orgány ČSBMB.
 - f) Podávat návrhy a hlasovat o návrzích podaných na všech schůzích, konferencích a jiných akcích organizovaných ČSBMB,
 - g) Být informován o pořádání všech akcí ČSBMB,
 - h) Přednostně získávat za stanovenou cenu časopisy a publikace vydávané ČSBMB.

- i) Kolektivním členům přísluší stejná práva kromě (d).

- (2) Člen je povinen:
- Dodržovat stanovy, plnit usnesení orgánů a aktivně se podílet na plnění úkolů ČSBMB.
 - Řádně vykonávat svěřené funkce.
 - Platit členské příspěvky.
 - Oznámit sekretariátu změny osobních údajů.

Článek 7

Zánik členství

- Individuální členství v ČSBMB zaniká:
 - Písemným prohlášením člena, že z ČSBMB vystupuje.
 - Nezaplacením členských příspěvků po dobu dvou let, ač byl člen o zaplacení upomenut.
 - Vyloučením člena. Člen může být vyloučen pouze ze závažných důvodů, zejména jedná-li v rozporu s povinnostmi, jež mu ukládají stanovy. O vyloučení člena rozhoduje výbor. Proti rozhodnutí se může vyloučený člen odvolat k valnému shromáždění, jež učiní konečné rozhodnutí.
 - Úmrtím.
- Kolektivní členství zaniká:
 - Na základě smlouvy uzavřené mezi ČSBMB a kolektivním členem.
 - Písemným prohlášením, že nadále nehodlá být kolektivním členem ČSBMB.
 - Rozhodnutím výboru o zrušení kolektivního členství, neplní-li organizace po dobu dvou let podmínky účasti na práci ČSBMB, aniž by toto neplnění projednala a odůvodnila. Proti tomu se může kolektivní člen odvolat k valnému shromáždění, které v dané záležitosti učiní konečné rozhodnutí.

Článek 8

Orgány ČSBMB

- Orgány ČSBMB, které zajišťují a řídí všechny úseky její činnosti jsou:
 - valné shromáždění,
 - výbor,
 - předsednictvo výboru (dále jen předsednictvo).
- Kontrolním orgánem ČSBMB pro hospodářskou činnost jsou revizoři.

Článek 9

Valné shromáždění

- Valné shromáždění všech členů je nejvyšším orgánem ČSBMB.
- Valnému shromáždění přísluší:
 - určovat hlavní směry činnosti ČSBMB pro období do příštího řádného valného shromáždění,
 - schvalovat zprávu výboru o činnosti ČSBMB za období od posledního valného shromáždění,
 - schvalovat zprávu revizorů za období od posledního valného shromáždění,
 - určovat počet členů výboru, počet revizorů a počet náhradníků uvedených orgánů s přihlédnutím k celkovému počtu členů ČSBMB,
 - usnášet se na zásadních hospodářských opatřeních,
 - vyřizovat s konečnou platností odvolání týkající se zrušení členství,
 - usnášet se na stanovách a jejich změnách,
 - usnášet se na zrušení ČSBMB.
- Řádné valné shromáždění se koná alespoň jednou za čtyři roky. Svolává je výbor.
- Výbor může svolat mimořádné valné shromáždění z vlastního podnětu. Musí je svolat na žádost alespoň jedné třetiny členů ČSBMB a to nejpozději

do jednoho měsíce od předložení písemné žádosti.

- (5) Valnému shromáždění předseda a jeho jednání řídí předseda, popřípadě místopředseda nebo jiný člen předsednictva pověřený předsedou.
- (6) Valné shromáždění je způsobilé usnášet se tehdy, je-li přítomna alespoň polovina členů. Nesejde-li se v určenou dobu potřebný počet členů, koná se valné shromáždění o půl hodiny později a je způsobilé usnášet se za jakéhokoli počtu přítomných.
- (7) Usnesením valného shromáždění je návrh, pro který hlasovala většina přítomných.

Článek 10

Výbor

- (1) Výbor řídí činnost ČSBMB po dobu svého funkčního období, které trvá čtyři roky.
- (2) Výbor zabezpečuje realizaci usnesení valného shromáždění a řídí činnost celé ČSBMB.
- (3) Výboru přísluší:
 - a) určovat počet členů předsednictva
 - b) volit předsedu, místopředsedy, vědeckého tajemníka, hospodáře a jejich náhradníky a volit další funkcionáře podle potřeby,
 - c) schvalovat zprávu o činnosti ČSBMB za jednotlivá období,
 - d) schvalovat zprávu o hospodaření ČSBMB za jednotlivá období,
 - e) pověřovat předsednictvo plněním konkrétních úkolů,
 - f) zabezpečovat přípravu valného shromáždění
 - g) schvalovat volební řád,
 - h) zabezpečovat přípravu voleb členů výboru a revizorů,
 - i) určovat výši členských příspěvků,
 - j) kooptovat za členy výboru nebo za revizory, kteří trvale opustili výkon funkce nebo pro plnění úkolů výboru

členy společnosti do počtu 25% členů výboru.

- k) zřizovat a rušit pobočky ČSBMB, popřípadě stanovit jejich územní obvod,
 - l) zřizovat nebo rušit sekce,
 - m) zřizovat a rušit komise pověřené plněním konkrétních úkolů a jmenovat jejich členy,
 - n) ustanovovat redakční rady a šéfredaktory časopisů a publikací vydávaných ČSBMB
 - o) určovat délku funkčního období výborů poboček a sekcí,
 - p) rozhodovat o členství a o jeho zrušení.
- (4) Schůze výboru svolává podle potřeby předseda nebo místopředseda, který předsedu zastupuje. Předseda svolá schůzi výboru vždy do dvou týdnů, byli o to požádán alespoň třetinou členů výboru. Nesvolá-li předseda v takovém případě schůzi výboru, může tak učinit některý z místopředsedů. K účasti na schůzích výboru mohou být přizváni předsedové poboček a předsedové sekcí, kteří mohou pověřit některého z členů výboru těchto složek ČSBMB, aby je na schůzích výboru zastupoval. K účasti na schůzích výboru mohou být přizváni další členové ČSBMB.
 - (5) Schůze výboru řídí předseda popřípadě některý z místopředsedů.
 - (6) Výbor je způsobilý se usnášet, je-li přítomna alespoň polovina jeho členů.
 - (7) Usnesení výboru je návrh, pro který hlasovala většina přítomných členů výboru, nebo pro nějž při rovnosti hlasů hlasoval předsedající.
 - (8) Pokud na základě svého usnesení či rozhodnutí předsedy hlasuje výbor k některé otázce korespondenčně, příp. elektronickou poštou, je hlasování platné, pokud je hlas odevzdán více než 50% členů výboru. Hlas odevzdaný elektronickou formou se uschovává spolu se zápisy o jednání výboru tak,

aby obsahoval v hlavičce zprávy údaje o místu a době odeslání. Na příští schůzi výboru je vždy nutno elektronické hlasování potvrdit.

Článek 11

Předsednictvo

- (1) Předsednictvo je výkonným orgánem výboru po dobu jeho funkčního období. Předsednictvo tvoří předseda, místopředseda, vědecký sekretář a hospodář.
- (2) Předsednictvu přísluší:
 - (a) řídit činnost ČSBMB podle pokynů výboru,
 - (b) povolávat za členy předsednictva, kteří trvale opustili funkce, náhradníky v pořadí, v němž byli zvoleni výborem,
 - (c) sjednávat podmínky kolektivního členství organizace,
 - (d) zpracovávat výroční zprávu o činnosti ČSBMB a sestavovat plán činnosti na příští rok,
 - (e) zpracovávat výroční zprávu o hospodaření ČSBMB a sestavovat rozpočet na příští rok.
- (3) Schůze předsednictva svolává podle potřeby předseda nebo místopředseda, který předsedu zastupuje. K jednání předsednictva mohou být podle potřeby přizváni další členové ČSBMB.
- (4) Schůze předsednictva řídí předseda, popřípadě místopředseda.
- (5) Předsednictvo je způsobilé usnášet se, je-li přítomna alespoň polovina jeho členů.
- (6) Usnesením předsednictva je návrh, pro který hlasovala většina přítomných členů předsednictva nebo pro nějž při rovnosti hlasů hlasoval předsedající.
- (7) Pokud na základě svého usnesení či rozhodnutí předsedy hlasuje předsednictvo k některé otázce korespondenčně, příp. elektronickou poštou,

je hlasování platné, pokud je hlas odevzdán více než 50% členů. Hlas odevzdaný elektronickou formou se uschovává spolu se zápisy o jednání předsednictva tak, aby obsahoval v hlavičce zprávy údaje o místu a době odeslání. Na příští schůzi předsednictva/výboru je vždy nutno elektronické hlasování potvrdit.

Článek 12

Revizoři

- (1) Dohled na hospodářskou činnost ČSBMB vykonávají jeden až tři revizoři, kteří z hospodářského hlediska posuzují i plnění úkolů ČSBMB.
- (2) Revizoři podávají zprávu o hospodaření výboru společnosti a valnému shromáždění.

Článek 13

Volby výboru a revizorů

- (1) Členové výboru, revizoři a jejich náhradníci jsou voleni na čtyři roky tajným hlasováním na základě předložené kandidátní listiny.
- (2) Volby řídí tříčlenná volební komise, její člen nemůže být zařazen na kandidátní listinu.
- (3) Počet kandidátů není omezen, návrhy mohou předkládat, pobočky, sekce i jednotliví členové. Zařazení do kandidátní listiny je podmíněno souhlasem navrženého.
- (4) Volby se uskutečňují na valném shromáždění ČSBMB nebo mohou být provedeny korespondenčně.
- (5) Návrhy kandidátů lze předkládat písemně před valným shromážděním, nebo ústně během valného shromáždění.
- (6) O výsledku voleb rozhoduje počet kladných hlasů u každého navrženého.
- (7) V případě korespondenčních voleb jsou zvoleni kandidáti, kteří získali největší počet hlasů ve stanoveném časo-

vém limitu (rozhoduje poštovní razít-ko). Minimální počet hlasujících není stanovován. Předpokladem korespondenčních voleb je rozeslání hlasovacích lístků a kandidátky všem členům ČSBMB v dostatečném časovém před-stitihu, stanoveném volebním řádem.

Článek 14

Dokumentace o jednáních orgánů ČSBMB

- (1) O jednáních všech orgánů ČSBMB se vedou písemné zápisy. Pokud je zápis pořízen elektronicky, musí být převeden do tištěné formy.
- (2) Zápisy jsou stran pravosti stvrzovány podpisem funkcionáře a zapisovatele.

Článek 15

Organizace vnitřních složek ČSBMB

- (1) Pobočky
 - a) Činnost pobočky řídí předseda volený na schůzi členy pobočky.
 - b) Členové pobočky mohou podle potřeby volit další funkcionáře.
 - c) Předsedové poboček svolávají schůzi svých členů podle potřeby.
- (2) Sekce
 - a) Činnost sekce řídí předseda volený na schůzi členy, kteří se podle svého odborného zájmu přihlásili k práci v sekci.
 - b) Členové sekce mohou podle potřeby volit další funkcionáře.
 - c) Předsedové sekcí svolávají schůzi svých členů podle potřeby.
- (3) Komise ČSBMB
 - a) Výbor ČSBMB může vytvářet koordinační, popřípadě pracovní komise pro organizování spolupráce s ostatními vědeckými společnostmi nebo s jinými organizacemi a institucemi.

- b) Členy komisí mohou být jen členové ČSBMB
- (4) Pro přípravu a plnění některých konkrétních úkolů, mohou orgány ČSBMB do pracovních komisí přizvat i nečleny ČSBMB.

Článek 16

Hospodaření

- (1) K hospodářskému zajištění úkolů ČSBMB slouží:
 - a) členské příspěvky,
 - b) převzatý majetek,
 - c) prostředky poskytované formou dotace ze státního rozpočtu prostřednictvím některého z úředních orgánů státní správy nebo od jiných organizací, či dary od sponzora,
 - d) příjmy vyplývající z vlastní činnosti ČSBMB,
 - e) dary a dědictví,
 - f) při hospodaření se ČSBMB řídí obecně závaznými právními předpisy a interními pravidly, která musí být s obecně platnými právními předpisy v souladu.

Článek 17

Zánik ČSBMB

V případě zániku ČSBMB přechází veškerý její majetek po vyrovnání závazků a pohledávek Radě vědeckých společností, s podmínkou, že jej odevzdá jiné dobrovolné organizaci, která by se do tří let po zániku ČSBMB ustavila pro plnění obdobných úkolů v oboru biochemie, molekulární biologie a příbuzných oborů.

Článek 18

Závěrečná ustanovení

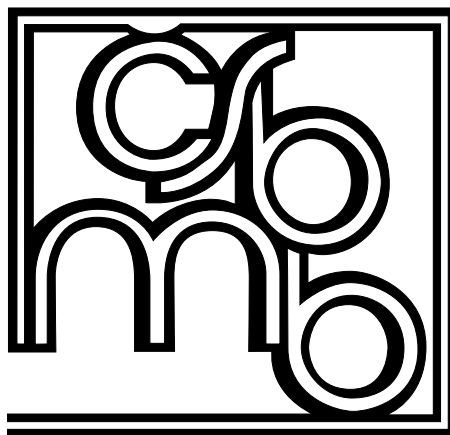
- (1) Statutárním zástupcem ČSBMB je předseda.
- (2) Výbor může zmocnit též jiné členy ČSBMB, aby v rozsahu, jenž určí,

ČSBMB zastupovali a jednali jejím jménem. Osoby takto zmocněné připojují k podpisu dodatek vyjadřující jejich zmocnění.

- (3) Usnesení orgánů ČSBMB, jež se týkají jejich členů se oznamují členům dopisy nebo členskými zprávami, či elektronickou poštou nebo na webových stránkách ČSBMB.
- (4) Tyto stanovy ruší Stanovy České společnosti pro biochemii a molekulární

biologii registrované Ministerstvem vnitra ČR dne 28. prosince 1993 pod evidenčním číslem VSP/1-2563/90-R.

- (5) Tyto stanovy byly schváleny valným shromážděním České společnosti pro biochemii a molekulární biologii v Praze dne 15. ledna 2003 a mění stanovy schválené Ministerstvem vnitra ze dne 28.12.1993 č.j.VSP/1-2563/90-R.



50 LET KATEDRY BIOCHEMIE PŘÍRODOVĚDECKÉ FAKULTY UNIVERZITY KARLOVY

Katedra biochemie je nejmladším chemickým pracovištěm na přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy. Před válkou neexistovalo na žádné z vysokých škol v tehdejší Československu samostatné oddělení biochemie. Biochemická pracoviště v moderním slova smyslu začala vznikat za 2. světové války, kdy se projevila potřeba řešit některé praktické biochemické problémy, zejména při výzkumu nových léků. Ke vzniku katedry biochemie na tehdejší matematicko-fyzikální fakultě UK (která v letech 1952 – 1959 zahrnovala vedle matematiky a fyziky i všechny obory chemie) přispěla jedna z pracovních skupin biochemiků Výzkumného a kontrolního ústavu Spojených farmaceutických závodů, kterou vedl RNDr. Josef Koštíř (nar. 1907). Dr. Koštíř se stal v poválečném období, po vytvoření Spojených farmaceutických závodů n.p. (SPOFA), přednostou jejich výzkumných laboratoří. Biochemické bádání, které nemělo v naší republice tradici, podporoval československý farmaceutický průmysl hmotně i morálně. Již v r. 1944 se podařilo izolovat první československý penicilín, a to nezávisle na angloamerických výzkumných skupinách. Roku 1948 byly biochemické výzkumné laboratoře Spofy dočasně umístěny v několika místnostech chemického ústavu UK, kde řada chemiků Spofy a univerzitních studentů hledala různé způsoby izolace a analýzy přírodních látek. Studenti zpracovávali své práce za vydatné pomoci průmyslu (vitamin B12, kreatinin, rostlinné fluorescenční pigmenty, jodované proteiny, chromatografie hydrofobních látek, sírné sloučeniny, rostlinné kyseliny, alkaloidy atd.).

Ve výzkumných laboratořích Spofy pracovali od r. 1945 studující chemie na svých výzkumných tématech ve spolupráci s teh-

dejší Ústavem pro organickou chemii, který vedl prof. Frejka. R. 1946 se RNDr. J. Koštíř habilitoval na přírodovědecké fakultě UK v oboru organické chemie a biochemie a začal toho roku přednášet a seznamovat posluchače s biochemickými metodikami v laboratořích a podnicích Spofy. Vychoval v tomto období řadu organických chemiků a biochemiků, kteří většinou zůstali v průmyslu a ve výzkumných laboratořích podniků různých rezortů. Po převzetí Výzkumného a kontrolního ústavu farmaceutických závodů ministerstvem zdravotnictví byl změněn jeho název na Výzkumný ústav pro farmacii a biochemii (VÚFB). Biochemici a organičtí chemici v něm pokračovali v práci na různých výzkumných programech důležitých pro praxi a části výsledků pak podávali jako závěrečné práce. Doc. Koštíř vedl i jednu laboratoř Ústavu pro organickou chemii UK.

Roku 1951 bylo zřízeno oddělení pro biochemii na Ústavu pro organickou chemii a jeho vedením byl pověřen doc. Koštíř. Oddělení biochemie mělo 4 asistenty, kteří se zabývali problémy biochemie cukrů, biosyntézy námelových a tropových alkaloidů a biochemií chlorofylu. **V r. 1953 se vytvořila samostatná katedra biochemie, první samostatná katedra biochemie na území republiky.** Jejím vedoucím se stal doc. Koštíř, který byl v r. 1954 jmenován profesorem. Pracoval v oblasti izolace a charakterizace přírodních látek. Zajímal se též o otázky regulace metabolismu a vzniku živých objektů. Byl autorem 2 učebnic biochemie (1960 a 1974), a dvou dalších knih popularizujících biochemii, členem řady vědeckých rad ústavů ČSAV i ústavů rezortních, členem redakčních rad odborných

časopisů, předsedou nomenklaturní komise Čsl. společnosti biochemické při ČSAV, atd.

Tehdejší vybavení katedry biochemie potřebnými přístroji bylo nedostatečné. Přesto se podařilo vychovat desítky posluchačů, kteří úspěšně své studium zakončili doktorskou disertací (pro získání titulu RNDr.) s biochemickou tematikou a začít s výukou podle nového studijního plánu, kdy byly vypracovávány diplomové práce (např. v období 1953 – 66 bylo vypracováno 107 diplomových prací).

Výuka biochemie prošla od r. 1945 několika etapami. Koncem 40. let byla výuka omezena na nepovinnou jednodílnou přednášku a na možnost pracovat na disertační práci z biochemie na tehdejším ústavu organické chemie. Po vzniku samostatné katedry biochemie byla základní přednáška rozšířena na dvouhodinovou a byla zařazena, stejně jako dvouhodinové (později tříhodinové) cvičení, do studijního plánu všech specializací chemie. Postupně byly zavedeny výběrové přednášky z biochemie, určené hlavně pro posluchače specializace biochemie. Zkouška z biochemie se také stala součástí státní závěrečné zkoušky. Od školního roku 1973/74, kdy bylo zahájeno studium podle nových studijních plánů, byla rozšířena základní přednáška biochemie na čtyřhodinovou a rovněž došlo k podstatnému zvýšení počtu hodin cvičení, byla zavedena vedle základních cvičení pokročilá cvičení, posléze pokročilá cvičení dvou stupňů. Takovýto rozsah výuky biochemie v podstatě platí do dnešních dnů. Nicméně již dlouho bylo zřejmé, že stav výuky neodpovídá zcela požadavkům současné biochemie. Interdisciplinární povaha biochemie vyžaduje, aby do studijního plánu biochemie byly zařazeny průběžně biologické disciplíny,

a to počínaje již I. ročníkem. Tyto dlouhodobé snahy byly naplněny až v současné době, kdy byl akreditován samostatný studijní program biochemie na úrovni bakalářského, magisterského i doktorského studia.

Prof. Koštíř byl vedoucím katedry do r. 1971, kdy byl jmenován vedoucím katedry doc. RNDr. PhMr. Jan Kocourek, CSc. (nar. 1926). Prof. Koštíř odešel v r. 1973 do důchodu, působil však na katedře dále jako externí učitel. V r. 1986 se stal vedoucím katedry doc. RNDr. Pavel Anzenbacher, CSc. (nar. 1947). Na konci roku 1989 se stal vedoucím katedry doc. RNDr. Gustav Entlicher, CSc. (nar. 1942), který byl v této funkci v r. 1994 vystřídán prof. RNDr. Marií Tichou, CSc. (nar. 1938). Od r. 1997 až dosud je opět vedoucím katedry prof. RNDr. Gustav Entlicher, CSc. Změny ve funkci vedoucího katedry v 90. letech jsou dány stanoveným funkčním obdobími.

Uplatnění absolventů katedry biochemie bylo vždy široké a nikdy nebyly problémy s jejich umístěním v rámci oboru. Nacházeli a nacházejí uplatnění ve výzkumných laboratořích nejrozličnějších vědeckých ústavů a vysokých škol jak v České republice tak v zahraničí. Vedle toho působí často jako vedoucí klinických laboratoří lékařských zařízení, v různých farmaceutických institucích, v zastoupení zahraničních firem i na pracovištích ochrany životního prostředí. Řada absolventů pokračuje ve studiu v doktorském studijním programu ať v naší republice nebo v zahraničí.

Gustav Entlicher

V článku byly použity údaje publikované v „Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy 1920-1980“ (dějiny, současnost, perspektivy), Univerzita Karlova, Praha 1981

ODBORNÁ ČINNOST PRACOVNÍKŮ KATEDRY BIOCHEMIE PŘÍRODOVĚDECKÉ FAKULTY UK

M. Tichá

Katedra biochemie, PřF UK, Albertov 2030, Praha 2

Činnost pracovníků katedry biochemie, obdobně jako pracovníků jiných vysokých škol, bývá rozdělována na aktivity pedagogické a aktivity odborné či vědecké. Toto rozdělení je formální a je nutné si uvědomit, že tyto dvě činnosti spolu velmi úzce souvisí a dá se říci, že čím těsnější je tato vazba, tím z této skutečnosti mají prospěch jak studenti tak pedagogové. Nemám teď na mysli jenom studenty PhD, kteří na katedře biochemie, stejně jako na jiných pracovištích, hrají velmi důležitou a nezastupitelnou roli při řešení vědeckých projektů. Na rozdíl od čistě vědeckých pracovišť, PhD studenti na katedře biochemie se zapojují i do vyučovacích procesu a aktivně předávají znalosti a poznatky svým mladším kolegům. Chtěla bych zdůraznit účast pre-graduálních studentů na odborné činnosti pracovníků katedry. Z velké části temata diplomových prací (popř. bakalářských prací) přímo souvisí nebo tvoří část řešených projektů. Studenti tímto způsobem jsou zapojeni přímo do vědecké aktivity a jejich snažení není samoučelné. Řešení nových problémů přináší i úskalí, jejichž překonávání je pro studenty poučné. Na druhé straně vedoucí diplomových prací jsou nuceni jasně formulovat cesty vedoucí k úspěšnému řešení. Při takovém výběru temat diplomových prací je pak možné, že část diplomových prací je publikována buďto tiskem nebo ve formě sdělení na sjezdech nebo konferencích. Při úspěšném řešení tematu diplomových prací se studenti ještě před ukončením magisterského studia podílejí na prezentaci výsledků. Na obr. 1 je znázorněn podíl publikovaných prací, na kterých se podíleli pre-graduální studenti. Obdobně to platí i pro prezentace formou ústních sdělení

a posterů. Další oblast, kde se prolíná tzv. pedagogická a odborná činnost členů katedry je uplatnění poznatků získaných při řešení projektů při přípravě praktických cvičení, zvláště pokročilých pro studenty biochemie.

Odborná či vědecká aktivita katedry biochemie je dokumentována seznamem publikovaných původních prací, souhrnných článků a kapitol v monografiích a prezentací na různých sjezdech, konferencích a symposiích, dále pak patentů, popularizačních článků, apod. Na obr. 2 je znázorněn počet publikací všech členů katedry za posledních 10 let, a současně i podíl publikovaných prací v zahraničních časopisech..

Při většině vědecké aktivity členové katedry biochemie spolupracují s pracovníky nejruznějších vědeckých ústavů, především ústavů Akademie věd- Míra této spolupráce je velmi rozdílná: někteří členové katedry biochemie jsou současně i pracovníky vědeckého ústavu akademie věd a v tom případě se jejich vědecká aktivita zcela prolíná a spolupráce mezi dalšími členy těchto laboratoří je velmi těsná. Dále existují dlouhodobé spolupráce pracovních skupin různých pracovišť, které jsou podloženy násobnými společnými grantovými projekty, Na druhé straně pak existuje vytvoření skupiny pracovníků různých pracovišť konkrétně pro řešení daného projektu.

Vzhledem k tomu, že většinu tzv. institucionálních prostředků spotřebovává katedra biochemie pro provoz základních pedagogických aktivit, vědecká činnost katedry biochemie je financována z velké části pomocí grantů jak Ministerstva školství tak různých grantových agentur. Na obr.3 je znázorněn počet grantů, na jejichž řešení se účastnili členové katedry biochemie buď

jako řešitelé nebo spoluřešitelé za posledních 10 let. Někteří členové katedry získali zahraniční granty: Fogarty International Program, EU, 4. rámcový program, VW Foundation, Howard Hughes Medical Institute, Tempus Phare, Barrande.

I když projekty jednotlivých pracovních skupin nemají společného jmenovatele, je možné nalézt společné zaměření; velká část těchto projektů se týká vztahu struktury biologicky zajímavých makromolekulárních látek k jejich funkci. Řešení tohoto problému u různých systémů se obecně rozpadá na několik kroků; jednak se jedná o detailní studium struktury makromolekulární látky, které je důležitou podmínkou pro pochopení jejich funkce. Dalším krokem může být sledování biologických aktivit (ať již enzymových, vazebných nebo jiných), izolované studované látky, často s pomocí modelových ligandů, které umožní podrobnou charakterisaci vazebného místa. Dalším krokem, který se již přibližuje k pochopení funkce makromolekulární látky v živém organismu, je pak studium vlivu různých dalších molekul vyskytujících se v přirozeném prostředí na strukturu, uspořádání a funkci makromolekuly. Jednotlivé výše jmenované kroky jsou předmětem bádání u jednotlivých projektů, které se týkají vztahu mezi strukturou a funkcí makromolekul u různých konkrétních systémů; jako jsou např. posttranslačně modifikované peptidy, receptory zabíječských buněk, pigment-proteinové a lipid-proteinové komplexy, adhesivní proteiny spermií a nebo enzymově aktivní proteiny, zejména ty, které se týkají degradace proteinů, metabolismu cizorodých látek či oxidu dusnatého.

V následujícím přehledu budou stručně shrnuta temata jednotlivých skupin pracovníků katedry biochemie, včetně jejich spolupracovníků. Přehled je pouze orientační, existují i vzájemné interakce mezi členy jednotlivých skupin. Při výčtu jednotlivých skupin jsem zvolila abecední pořadí podle jména jednoho ze členů této skupiny.

I Studium peptidových hormonů

- a) Peptidové hormony (insulin, oxytocin, vasopresin) a jejich deriváty připravené chemickou syntesou a enzymovou semisyntesou;
- b) Studium gonadotropních hormonů ryb a jejich využití v reprodukci;
- c) Studium úlohy peptidas v chovu ryb a raků

PřF UK: J. Barthová, H. Ryšlavá

PhD studenti: L. Klasová, J. Straková

Spolupracovníci: ÚOCHB.(T. Barth, I. Selicharová), VÚRH JČU (J. Kouřil, P. Kozák, J. Hamáčková)

Zahraniční spolupráce: Copenhagen University, Dánsko; ÚEE SAV, Bratislava, FÚ, Bulgarian Academy of Science, Sofia, Bulharsko,

II Proteinové složení membránových mikrodomén leukocytů

Aktivující lymfocytární receptory lektinového typu

- a) Analýza membránové aktivační mikrodomény obsahující receptor NKR-PI
- b) Výzkum vazebných míst pro vápník a sacharidy v aktivačním receptoru CD69

PřF UK: K. Bezouška, J. Pavlíček

PhD studenti: P. Man, O. Plíhal, P. Pompach, L. Mihok,

Spolupracovníci: MBU AV ČR (A. Fišerová, Křen, V. Havlíček),

Zahraniční spolupráce: University of Hamburg, SRN; University of Kiel, SRN; University of Ottawa, Kanada,

III. Alternativní cesty biosynthesy oxidu dusnatého

- a) studium metabolických cest tvorby oxidu dusnatého, které jsou nezávislé na NO-synthase (tzn. na oxidaci argininu na citrulin a NO)

PřFUK: G. Entlicher, S. Ekllová, A. Šonská

PhD studenti: K. Chalupský, P. Bartík,

Spolupráce: I.LF UK

Zahraniční spolupráce: University of Strasbourg, Francie

IV. Proteasy v regulaci patologických stavů

- a) Struktura, aktivita a inhibice retrovirových proteas, zejména proteasy z viru HIV
- b) Příprava a charakterisace neuropeptidů a dalších enzymů metabolisujících neurotransmitery

PřF UK: J. Konvalinka

PhD studenti: P. Mičochová, P. Sachs, K. Skalická, J. Frejdová

Spolupracovníci ÚOCHB (K. Stříšovský, C. Bařinka, T. Uhlíková), UMG

Zahraniční spolupráce: University of Heidelberg, SRN; Institute of Molecular Biotechnology, Jena, SRN; NIH, Bethesda, USA

V. Lipidové signální molekuly a exprese proteinkinasy C v myokardu a jejich úloha v mechanismu kardioprotekce

- a) exprese a regulace proteinkinasy C v srdečním svalu,
- b) úloha membránových fosfolipidů myokardu za různých podmínek,
- c) analýza LDL lipoproteinových částic

PřF UK: F. Novák, O. Nováková, B. Hamplová

PhD studenti: J. Ježková, I. Marková

Spolupráce: IV. Interní klinika I. LF UK (A. Žák, E. Tvrzická, F. Novák, M. Vecka, B. Staňková), FU AV ČR (F. Kolář, J. Průcha, J. Neckář)

VI. Biochemické změny v rostlinách ovlivněných biotickým stresem

- a) fyziologické a biochemické změny způsobené virovou infekcí,
- c) biotický stres u transgenního Pssu-ipt tabáku

PřFUK: H. Ryšlavá

Spolupráce: UEB AV ČR (N. Čeřovská, H. Synková)

VII: Biochemie fotosyntézy

- a) Oligomerní formy fotosystému 2 vyšších rostlin a sinic
- b) Odezva rostlin na abiotický stres vybranými těžkými kovy

PřF UK: D. Sofrová, T. Kučera

PhD studenti: E. Tůmová

Spolupráce: Agronom. fak., ČZU, Mikrobiologický ústav AVČR, Třeboň

Zahraniční spolupráce: Istituto di Biochimica ed Ecofisiologia Vegetali del CNR, Montorotondo Scalo, Itálie

VIII Studium struktury a funkce hemoproteinů Studium mechanismu karcinogeneze a účinku protinádorových léčiv

- a) vztah mezi strukturou a funkcí enzymů transformujících karcinogeny a léčiva
- b) studium struktury hemových enzymů spektroskopickými metodami,
- c) studium struktury enzymů fotoafinitivním značením,
- d) funkce aromatasy v metabolismu hormonů a karcinogenesi,
- e) diagnostika prekarcinogenních stavů detekcí aduktů karcinogenů s DNA,
- f) mechanismus působení protinádorových léčiv

PřF UK: M. Stiborová, J. Hudeček,

P. Hodek, M. Šulc, L. Bořek-Dohalská,

PhD studenti: M. Mikšanová, V. Martínek,

D. Aimová, H. Rýdlová, J. Páca, J. Poljaková,

V. Suchá, M. Beneš

Spolupráce: ÚOCHB AV ČR (T. Macek), VŠCHT (M. Macková, J. Páca), Výzkumný ústav biofarmacie a veterinárních léčiv (P. Trefil), LF UP Olomouc (P. Anzenbacher)

ÚFCHJH AV ČR (M. Hoff)

Zahraniční spolupráce: German Cancer Centrum, Heidelberg, SRN; University of Louvain Medical School Brussels, Belgie; University of Texas, USA; Institute for Molecular Science, Okazaki, Japonsko;

IX. Úloha povrchových proteinů spermie v procesu fertilisace
Methody studia vazebných interakcí

- a) studium struktury povrchových proteinů spermie ve vztahu k jejich funkci, a vlastností jejich agregovaných forem,
- b) vazebné interakce povrchových proteinů spermie s komponentami

přirozeného prostředí, ve kterém se gamety nacházejí

- c) využití rozdílných vazebných vlastností isoform enzymů k diagnostickým účelům

PřF UK: M. Tichá, J. Liberda

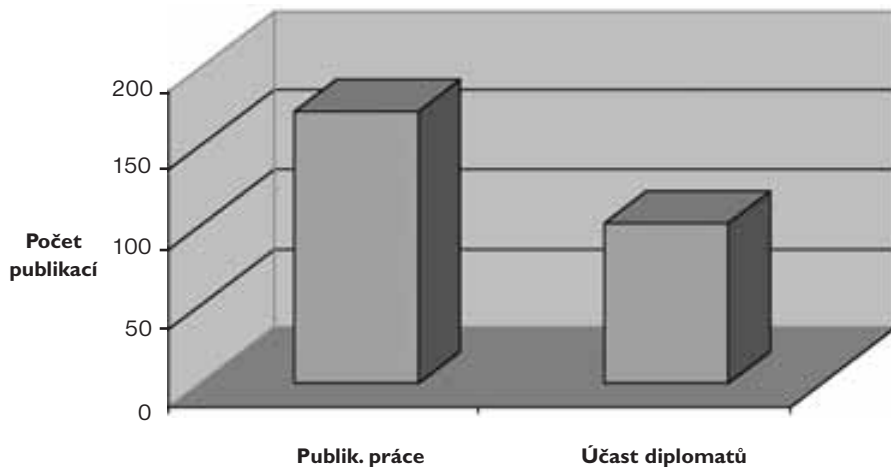
PhD student: P. Jelínková

Spolupráce: UMG AV ČR (V. Jonáková, M. Kraus, P. Maňásková), VUVL Brno (Z. Věžník, Z. Zralý) (ad a, b)

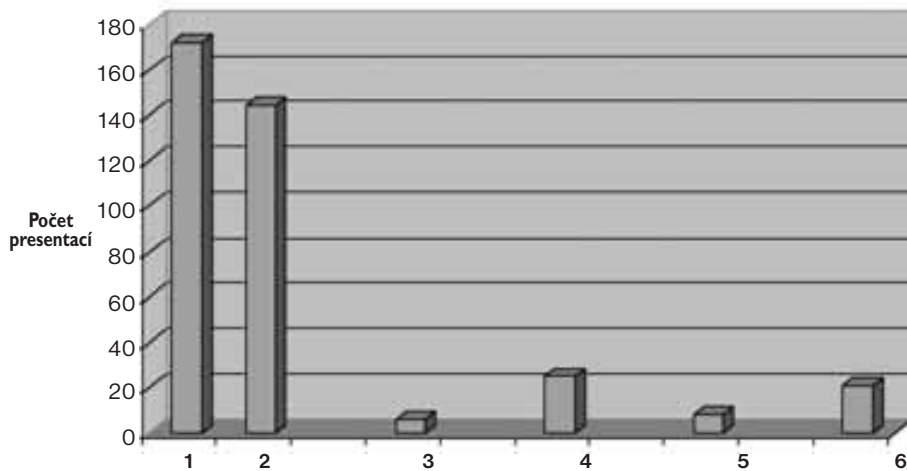
I. LF UK (Z. Kučerová), PřF UK, katedra anal. chem. (V. Pacáková) (ad c)

Zahraniční spolupráce: Chemický ústav SAV Bratislava

Obr. 1. Účast diplomatů na publikační aktivitě

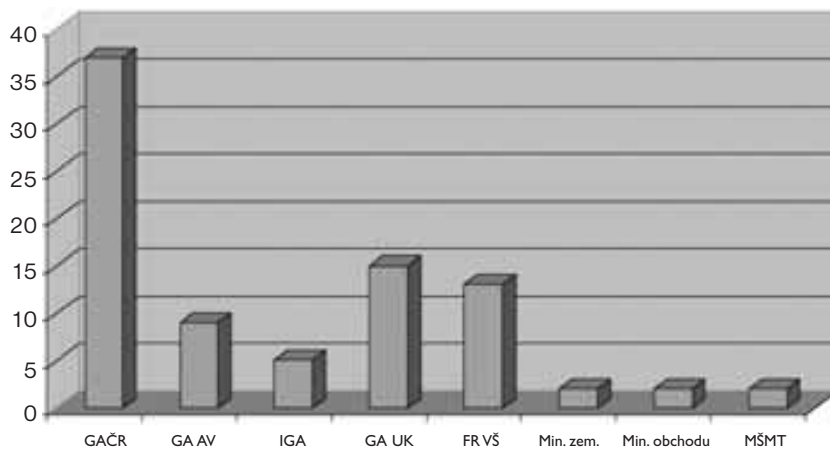


Obr. 2. Publikační činnost členů katedry biochemie za posledních 10 let



1 – původní práce, 2 – původní práce v zahraničních časopisech, 3 – monografie,
4 – přehledné články, 5 – popularizační články, 6 – patenty

Obr. 3. Granty České republiky



POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ MOLEKUL METODAMI MOLEKULÁRNÍ MECHANIKY

Karel Huml

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6

E-mail : huml@imc.cas.cz

Jiří Vondrášek

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR a Centrum komplexních molekulových systémů a biomolekul, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

E-mail : jirka@uochb.cas.cz

Úvod

Při výpočtech strukturního chování malých molekul a jejich reakcí se obvykle využívají metody kvantové mechaniky. V případě velkých molekul (desítky až tisíce atomů) by byl kvantově mechanický výpočet velice náročný a proto se dává přednost metodám vycházejícím z jednodušších klasických *mechanických* představ, kdy jednotlivé atomy jsou chápány jako tuhé koule zanedbatelného poloměru a vazby jako pružiny charakterizované svoji délkou a silovou konstantou. Odtud pochází název *molekulární (molekulová) mechanika*.

Některé základní pojmy

Metoda molekulární mechaniky je založena na několika předpokladech:

- Potenciální energie systému je dána pouze polohou atomových jader.
- Parametry získané experimentálně nebo metodami *ab initio* pro jednu izolovanou strukturu jsou přenositelné na strukturu jinou, která tuto obsahuje.
- Potenciální energie je dána *součtem* jednotlivých příspěvků reprezentujících deformační energii (Hookův zákon), van der Waalsovské interakce, elektrostatické působení (Coulombův zákon), případně další vlivy, které od sebe oddělují jednotlivé typy potenciálových funkcí a vymezují je použitelnost. (Leach 1999).

Odtud vyplývají i jistá omezení. Molekulární mechanika neřeší úlohy jako jsou:

- Transfer elektronů (absorpce fotonů).
- Elektronové transportní jevy.
- Vznik a zánik chemických vazeb.
- Transfer protonů (acidobasické reakce) (BIOSYM 1995).

Původně se molekulární mechanika užívala převážně k nalezení rovnovážných konformací odpovídajících minimální potenciální energii. Proto se ujal název *konformační analýza*, resp. *technika minimálního napětí*. Obdobně metoda použití molekulární mechaniky při výpočtu molekulárních vibrací je známá jako *model silových polí*, resp. při simultáním výpočtu struktury a vibrací jako metoda *konzistentního silového pole*. Mezi silovým polem F a potenciální energií V se přitom předpokládá platnost vztahu

$$F = - \text{grad } V .$$

Potenciály se většinou aproximují párovými potenciály, což vedlo k názvu *metoda atom-atom potenciálů* (Bürgi 1986). Vzhledem k tomu, že silové konstanty se určují z experimentů, hovoříme též o *metodě empirických potenciálů* (Perun, Propst 1989).

Pokud nepřihlížíme k časovým změnám poloh atomů, pak molekulární mechanika slouží převážně k *molekulárnímu modelování* (MM) jednotlivých konformací molekul v rovnováze.

Složitější případ odpovídá studiu chování molekuly, která získala nenulovou kinetick-

kou energii a její atomy se řídí Newtonovou pohybovou rovnicí

$$-dV/d\mathbf{R}_i = m_i d^2\mathbf{R}_i/dt^2,$$

kde \mathbf{R}_i je polohový vektor jádra i -tého atomu, m_i jeho hmotnost a t je čas. Hovoříme o *molekulární dynamice* (MD). V obecném případě řešení soustavy uvedených pohybových rovnic se postupuje iterativní metodou, kdy v jednotlivých krocích se počítá potenciální energie metodami molekulární mechaniky.

Kromě výpočtu možných konformací *deterministickou* metodou molekulární dynamiky je možno postupovat i metodami *stochastickými*, které jsou rovněž *ergodické*, tj. postupně procházející celý konfigurační prostor a tím postupně mohou rekonstruovat Born-Oppenheimerovu nadplochu potenciální energie studovaného systému. Patří sem například *Metropolisova metoda Monte Carlo* (MC) (Metropolis et al 1953). Obě metody, molekulární dynamiky i Monte Carlo, se obvykle kombinují s postupným „chlazením“ systému (*annealing*), který byl původně navržen pro hledání globálního minima potenciální energie (Doucet, Weber 1996, Höltje, Folkers 1997). Z dalších metod využívajících molekulární mechaniku je možné jmenovat *metodu genetického algoritmu* (GA) (Payne, Glen 1993) a *metodu distanční geometrie* (DG) (Crippen, Havel 1988).

Samostatnou skupinu metod tvoří tzv. *metody počítačové simulace*, kdy z informací o *mikroskopické* struktuře a chování studované molekuly, s rozlišením jednotlivých atomů, počítáme *makroskopické* charakteristiky velkého souboru obdobných molekul, lišících se svými konformacemi. Tak lze například počítat termodynamické charakteristiky, jako jsou entropie nebo Gibbsova energie. Tyto postupy označujeme též jako *počítačový experiment*. Vychází se z výběru konformací produkovaného některou z dříve uvedených postupů. Tyto výběry se pak zpracovávají metodami *statistické mechaniky* (Doucet, Weber 1996).

Vedle empirických potenciálů existují i tzv. *průměrné silové potenciály* (*mean force potentials*) odvozené statisticky ze známých struktur (Höltje, Folkers 1997, Leach 1998). Rovněž jsou užívány metody *pseudomolekulární mechaniky*, které nehledají konformace v závislosti na energii, ale minimalizují speciální *napěťové funkce*. Representantem tohoto postupu je počítačový program CONCORD (Pearlman 1987, Hendrickson et al 1993) používaný k výpočtu třírozměrné struktury molekul z dvourozměrných chemických struktur uváděných v datových bankách (např. v Chemical Abstracts). Hovoříme o tzv. *metodách založených na pravidlech* (*rule-based methods*). Bývají užity v expertních systémech pracujících s umělou inteligencí (AI), jako například v programu DENDRAL pro simulaci spekter (Glen, Payne 1995). Uvedený postup je rovněž vhodný pro konstrukci tří-rozměrných (3D) struktur postranních řetězců bílkovin (Summers, Karplus 1989).

Metody založené na molekulární mechanice jsou užívány zejména v oblasti farmaceutické chemie (Perun, Propst 1989). V literatuře se s nimi setkáváme pod označením CADD (*computer-aided drug design*), CAMD (*computer-aided molecular design*), CAMM (*computer-aided molecular modelling*) a pod. Vzhledem k rozsáhlosti problematiky omezíme se v následujícím jen na několik aplikací molekulární mechaniky při výpočtu časově neproměnných konformací.

Metody minimalizace potenciální energie (*energy-based methods*)

Tyto metody vycházejí z předpokladu, že 3D struktura s minimální potenciální energií odpovídá optimální struktuře, která je stabilní, avšak nemusí být ještě optimální z hlediska funkčnosti (Shoichet et al 1995). Naopak molekuly s vyšší potenciální energií, ale konformací blízkou transičnímu stavu jsou z hlediska funkce výhodnější. Přes tuto výhradu jsou metody minimalizace potenciální energie zastoupeny prakticky ve všech

programech modelování molekul (Höltje, Folkers 1997, Doucet, Weber 1996). Samy o sobě mohou s úspěchem řešit struktury malých molekul. V případě velkých systémů jsou užitečnou metodou v kombinaci s experimentálními poznatky získanými například z difrakce záření X, NMR, skanovací transmisní elektronové kryomikroskopie, jak tomu bylo např. při řešení problému interakce insulinu s insulinovým receptorem (Ottensmeyer et al 2000, Huml et al 2002).

Metody srovnávací

(*Comparative, knowledge-based, homology-based methods*).

Využívají poznatku, že bílkoviny podobné primární struktury mají tendenci vytvářet podobné 3D struktury, neboť 3D struktury jsou konservativnější než struktury primární (Greer 1990, Leach 1998, Doucet, Weber 1996, Blundell et al 1987, Swindells, Thornton 1991). Uvedené postupy můžeme rozdělit do dvou skupin. Především jsou to postupy *přímé*, kdy z datové banky bílkovin nebo nukleových kyselin vybíráme struktury na základě sekvenční homologie a určujeme jejich společné strukturní rysy (sekundární struktury, motivy a pod.), které pak připišíme studované molekule, která je s uvedenou skupinou homologická. Druhý postup je pak *inverzní*, kdy máme informace o hrubých 3D rysech studované makromolekuly (například z difrakce záření X nebo z NMR) a hledáme na základě homologie možné uspořádání primární struktury, tak aby vyhovovala známé 3D struktuře.

Metody založené na znalosti 3D struktury

(*Structure-based, rational, site-directed, fragment-based, receptor-based methods*).

Ve farmaceutické chemii při navrhování nových léčiv se často vychází ze známé 3D struktury jedné či obou reagujících látek (Holloway et al 1995, Timms, Wilkinson 1997). V literatuře se uvádějí dva příbuzné postupy. Předně je to umístění (*docking*) malé molekuly (léčiva) známé geometrické

i chemické struktury do kavity rovněž známé struktury cílové molekuly (receptoru, enzymu). Vhodné kandidáty pro vazebnou interakci obvykle vybíráme ze strukturních datových bank. Jako kritérium slouží například stupeň překrytí povrchů obou zúčastněných molekul (Grant, Pickup 1997). Druhý, obtížnější je případ známé struktury cílové molekuly, ale neznámého léčiva, kdy se léčivo konstruuje přímo v kavitě metodou *de novo (from scratch)* (Borman 1992). Nabízejí se dvě možné cesty. Předně, nejprve se naváží fragmenty budovaného léčiva na všechna reakční centra v kavitě, načež se tyto fragmenty propojí do struktury nového léčiva (*linking*). Alternativou je budování nové molekuly z jediného fragmentu léčiva (*seat*) umístěného do kavity cílové molekuly, kdy postupným zvětšováním tohoto fragmentu, s přihlédnutím k aktivním místům, se zaplní celá kavita (*building*) (Verlinde, Hol 1994, Babu et al 1995, Burt et al 1991). Metody založené na znalostech struktury rovněž využívají metod molekulární mechaniky jednak k optimalizaci, jednak k hodnocení (*scoring*) různých konformací a interakcí.

Závěr

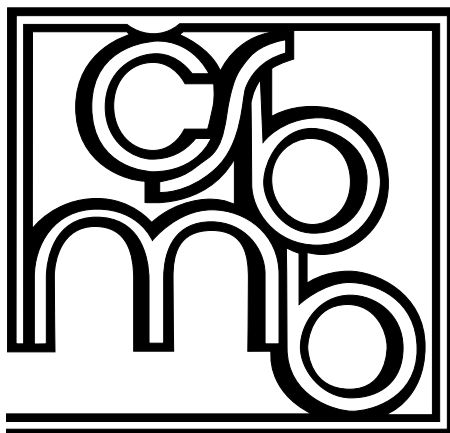
Vedle uvedených základních postupů modelování molekul existuje celá řada specializovaných metod, či jejich hybridů, řešících specifické problémy počítačového modelování. Rozvoj počítačové techniky a rostoucí počet zainteresovaných pracovišť dává naději, že počítačové modelování se stane rychlou a relativně levnou standardní pomůckou v chemii při navrhování nových látek.

Práce byla podpořena Grantovou agenturou Akademie věd České republiky (grant č.S5020101) a Ministerstvem školství České republiky v rámci projektu LN 00A032.

Literatura

- Babu Y. S. et al: Acta Crystallogr., D51 (1995) 529.
BIOSYM, *Discover Manual*, Part I, (1995) 2-3.
Blundell et al : Nature, 326 (1987) 347.
Borman S.: C & N, August 70 (32) (1992) 18.

- Bürgi H.-B.: IUCr Sumer School, Leipzig (1986).
- Burt S.K. et al: *Curr. Opin. Struct. Biol.* 1 (1991) 213.
- Crippen G.M., Havel T.F.: *Distance geometry and molecular conformation*. Vol 15, J.Wiley and Sons, Res. Studio Press, New York and Chichester (1988).
- Doucet J.-P., Weber J.: *Computer-Aided Molecular Design*, Academic Press, London (1996), s. 422, 428.
- Glen R.C., Payne A.W.R.: *J. Comput.-Aided Mol. Design* 9 (1995) 181.
- Grant J.A., Pickup B.T.: in *Comp. Simul. Biomol. Systems*. Vol. 3. Eds. W.F. van Gunsteren, P.K. Weiner, A.J. Wilkinson, KLUWER/ESCOM, Dordrecht (1999), s.170.
- Greer J.: *J. Mol. Biol.* 153 (1981) 1027.
- Greer J.: *J. Mol. Biol.* 153 (1981) 1043.
- Greer J.: *Proteins* 7 (1990) 317.
- Hendrickson M.A. et al: *J. Chem. Info. Comput. Sci.* 33 (1993) 155.
- Holloway M.K. et al : *J. Med. Chem.* 38 (1995) 305.
- Höltje H.-D., Folkers G.: *Molecular Modeling*, WCH, Weinheim (1997), s.103.
- Huml K., Klasová L., Barthová J. : *Chem. Listy* 96 (2002) 698.
- Leach A.R.: *Molecular Modelling*, A.D. Longman, Singapore (1998), s.131.
- Metropolis N. et al : *J. Chem. Phys.* 21(1953) 1087.
- Ottensmeyer F.P. et al : *Biochemistry* 39 (2000) 12103.
- Payne A.W.R., Glen R.C.: *J. Mol. Graphics* 11 (1993) 74.
- Pearlman R.S.: *Chem. Design Auto. News*, 2 (1987) 1.
- Perun T.J., Propst C.L., Eds.: *Computer-aided drug design*, M. Dekker: New York, Basel (1989).
- Timms D., Wilkinson A.J.: in *Comp. Simul. Biomol. Systems*. Vol.3. Eds. W.F. van Gunsteren, P.K. Weiner, A.J. Wilkinson, KLUWER/ESCOM, Dordrecht (1999), s.466.
- Shoichet B.K. et al: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 92 (1995) 452.
- Swindells M.B., Thornton J.M.: *Curr. Opin. Struct. Biol.* 1 (1991) 219.
- Summers N.L., Karplus M.: *J. Mol. Biol.* 210 (1989) 785.
- Verlinde C.L.M.J., Hol W.G.J.: *Structure* 2 (1994) 577.



Sekce PEPTIDOVÁ

Biologicky aktivní peptidy

VIIIth CONFERENCE ON BIOL. ACTIVE PEPTIDES, PRAGUE, 23rd – 25th APRIL 2003.

In beautiful spring weather on April 23rd, the renovated lecture hall of the Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Academy of Sciences of the Czech Republic welcome more than 50 Czech and Slovak peptide researchers together with 8 invited distinguished guests from abroad who participated at the national peptide conference called Biologically Active Peptides VIII (these conferences take place biannually, the official language being Czech and English). The Conference was opened by the contemporary director of the Institute, Dr. Z. Havlas, DrSc, and the national representative of Czech peptide researchers in EPS, Dr. Jiřina Slaninová, PhD.

In the following days (23rd – 25th April) altogether 18 lectures and 20 posters were presented. Plenary lectures were delivered by Dr. M. Flegel (PolyPeptide Lab., Prague, Czech Rep.) concerning peptides as bulk pharmaceutical chemicals, Dr. V. Kašička (Inst. Org. Chem. Biochem., Acad. Sci. Czech Rep., Prague, Czech Rep.) on recent advances in high-performance capillary electrophoresis of peptides, Dr. L. Vezenkov (Dept. Org. Chem. Univ. Chem. Technology, Sofia, Bulgaria) on new analogues of anticoagulant peptide TIC, Dr. T. Pajpanova (Inst. Mol. Biol., Bulg. Acad. Sci, Sofia, Bulgaria) on design and synthesis of new N-containing building blocks, Dr. B. Penke (Dept. Med. Chem. A. Szent-Gyorgy Med. Univ, Szeged, Hunga-

ry) on protein aggregation, neurodegeneration and neuroprotection, Dr. M. Ellmerer (Inst. Med. Technol. Health Manag., Graz, Austria) on long-acting insulin analogues and integrated physiology and Dr. D. Kodřík (Inst. Entomology, Acad. Sci Czech Rep., České Budějovice, Czech Rep.) on characterization and function of adipokinetic peptide from the bug *Dysdercus cingulatus*. From other lectures the participants appreciated contributions of Mgr. O. Šedo (MALDI time of flight mass spectrometry analysis of humanin-like peptides), Ing. J. Šebestík (May bis-intercalator peptides influence prion aggregation?), Bc. A. Cencialová (Synthesis and qualities of fluorescent labelled derivatives of human insulin), Mgr. L. Klasová (Truncated analogues of insulin modified in position B26) and Dr. P. Jelínková (Characterization of peptide proteinase inhibitors isolated from boar seminal plasma). In the poster section, many young peptide chemists and biochemists presented their work. Let us mention the contributions of the Greek students from Patras, M. Fragiadaki and E. Bissyris (New oxytocin analogues), A. Galanis (ACE active sites) and A. Zompra (New Leuprolide analogues), which belonged to the best ones. The competition was however strong – very nice work was presented as posters also by P. Táborský and O. Šedo (Masaryk Univ., Brno), V. Šolínová and J. Maixnerová (IOCB, Prague). All the

contributions will be published in English as short communications (2-3pp) in the Proceedings in Collection Symposium Series. At the end of the Conference, the previous and the present Czech national representatives in EPS (M. Flegel and J.Slaninová) informed the participants about the state of art of the most important upcoming event in the year 2004 – the 28th EPS and 3rd IPS which will take place in Prague under joint organisation of Czech and Israeli peptide groups (Co-chairs: M. Flegel, M. Fridkin, C. Gilon, J. Slaninová). They also mentioned the European Peptide Society and the decisions made in Sorrento concerning the Executive committee, the membership etc.

Thanks to the sponsor contributions (INGOS Ltd., IRIS Biochem. GmbH, MERCK Ltd., IntracoMicro Ltd., PolyPeptide Labs Ltd., Schoeller Ltd., Sigma Aldrich Ltd.), the get-together party could take place in the

nearby Masaryk Colleague on Wednesday and the participants could enjoy the W. Tennessee's play in the theatre Viola on Thursday evening.

We can conclude that the meeting fulfilled our expectations. The peptide research in Czechia and Slovakia is living, the interest in peptides is even increasing (there were namely many informal participants of the Conference coming only for special sections). We hope that the interest in peptides will survive and that our probable joining the European Community will not mean their exodus. Nowadays our main effort will be devoted to the organisation of the 28th EPS and 3rd IPS which will take place in Prague, in the Congress Centre, in September 5 – 10, 2004. We hope many members of the European Peptide Society will come to Prague next year. .

Jiřina Slaninová



1. Participants of the Conference in front of the Institute

(On the white thing that I am having in my hand is the name of the Conference. Again as in the last years it is not visible. JSI)

Sekce SEPARAČNÍCH METOD

ZPRÁVA O SYMPOSIU SEPARATIONS IN THE BIOSCIENCES – SBS 2003

3. Mezinárodní symposium o separacích v biovědách (3rd International Symposium on Separations in the BioSciences, SBS 2003) se konalo ve dnech 13 – 18. května 2003 v Moskvě, v kongresovém areálu moskevské radnice naproti sídlu vlády Ruské federace (tzv. Bílému domu) v těsném sousedství českým návštěvníkům Moskvy z dřívější doby dobře známé budovy RVHP. Symposia se zúčastnilo více než 400 odborníků ze 42 zemí čtyř kontinentů, specialistů v separačních metodách, zejména v chromatografii a elektroforéze, ale i uživatelů separačních metod v různých oborech biologických věd – biochemii, bioorganické chemii, molekulární biologii, biomedicině, biofarmacii a biotechnologii. Potěšitelná byla početná účast 22 odborníků z České republiky, kteří představovali spolu s Italy nejsilněji zastoupenou skupinu zahraničních účastníků. Domácí odborníci z Ruské federace tvořili přibližně polovinu účastníků.

Symposium SBS 2003, s podtitulkem „100 let chromatografie“ bylo věnováno stému výročí vynálezu chromatografie Michailem Cvěttem, které si v letošním roce připomínáme. Symposium zahájil starosta Moskvy Jurij Lužkov, který se kdysi jako pracovník Ruské akademie věd chromatografií také zabýval. Zdůraznil obrovský význam chromatografie v praktickém životě společnosti – údaje získané chromatografickými metodami v biologických vědách nebo při analý-

ze životního prostředí ovlivňují i politická rozhodnutí.

Úvodní, slavnostní sekce symposia byla věnována životu a dílu Michaila Cvěta a historii chromatografie. Osobní životní osudy M. Cvěta i hlavní milníky jeho vědecké dráhy přiblížil v úvodní přednášce předseda symposia, Vadim Davankov z Ruské akademie věd. Další dvě přednášky této sekce, přednesené R. Kaiserem (Univ. of Leipzig) a H. Engelhardtem (Univ. of Saarland, Saarbrücken) byly pojaty jako zastávky na historické cestě plynové a kapalinové chromatografie.

V první pracovní sekci symposia, věnované chromatografickým a elektromigračním separacím biočástic a biomakromolekul, představil S. Hjertén (Univ. of Uppsala) nový koncept „syntetických protilátek“ založený na polymeraci polyakrylamidového gelu v přítomnosti makromolekul a biočástic a využití těchto „protilátek“ pro separaci a purifikaci bílkovin, virů a bakterií. Separace těchto biopolymerů a biočástic chromatografickými a elektromigračními metodami a mikrotermální field-flow frakcionací byly námětem přednášek B. V. Mchedlishviliho (Inst. of Crystallography, Russian Acad. Sci., Moscow), D.W. Armstronga (Iowa State Univ., Ames) a J. Jančí (Univ. of La Rochelle). V sekci enantioselektivních separací byly předvedeny nové chirální stacionární fáze na bázi derivátů polysacharidů (Y. Okamoto,

Univ. of Nagoya) a chirálních iontoměníčů (W. Lindner, Univ. of Vienna) a dále zde byly uvedeny kinetické studie interkonverzí stereoizomerů chromatografickými a elektromigračními metodami (V. Schurig, Univ. of Tübingen).

I když je pochopitelné, že na symposiu věnovaném 100. výročí chromatografie převládaly příspěvky věnované chromatografickým metodám, opomenuty nezůstaly ani příbuzné metody elektromigrační. V sekci věnované těmto technikám byly uvedeny příspěvky G. J. de Jonga (Univ. of Utrecht) o sledování ionogenních i neionogenních příměsí v léčivech micelární elektrokinetickou chromatografií s hmotnostní spektrometrickou (MS) detekcí, F. Tagliara (Univ. Verona) o využití kapilární elektroforézy v soudním lékařství a příspěvek autora této zprávy o analýze a purifikaci biologicky aktivních peptidů kapilární a průtokovou zónovou elektroforézou a izotachoforézou.

V samostatných sekcích byly shrnuty nedávné pokroky a naznačeny nové perspektivy v dnes již klasických a „zralých“ chromatografických metodách, v plynové a tenkovrstvé chromatografii, přednáška V.N. Sidelnikova (Boreskov Inst. of Catalysis, Novosibirsk) pojednávala o multikapilárních kolonách, V.A. Krylov (State Univ. of Nizhny Novgorod) uvedl příklady využití kapilární plynové chromatografie ve stopové analýze superčistých látek a při analýze životního prostředí, V.G. Berezkin (Topchiev Inst. of Petrochemical Synthesis, Russian Acad. Sci., Moscow) hovořil o invariantních hodnotách relativních retencí v plynové chromatografii a E. Tjihak (Plant Protection Inst., Hungarian Acad. Sci., Budapest) referoval o vysokoúčinné přetlakové tenkovrstvé chromatografii a o možnostech jejího využití v biomedicině.

Mezinárodně uznávaní odborníci vystoupili rovněž v sekci vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC), H. Engelhardt (Univ. of Saarland, Saarbrücken) shrnul současné poznatky o vztazích mezi strukturou

analytů a chromatografickou retencí, N. Tanaka (Kyoto Inst. of Technology) seznámil s přednostmi i s omezeními moderních monolitických kolon pro kapilární HPLC, G. Guiochon (Univ. of Tennessee, Knoxville) pojednal o vlivu složení mobilní fáze na měření jednosložkových adsorpčních izoterem frontální analýzou v kapalinové chromatografii s reverzní fází a B. Buszewski (Copernicus Univ., Toruň) představil nové směry v přípravě chromatografických sorbentů a kolon.

Samostatná sekce byla věnována chromatografii syntetických i přírodních polymerů, ve které byly uvedeny mj. přednášky A.V. Gorškova (Inst. of Chem. Physics, Russian Acad. Sci., Moscow) o kritické chromatografii makromolekul, D. Bereka (Inst. of Polymers, Slovak Acad. Sci., Bratislava) o využití spojených chromatografických technik pro studium syntetických polymerů a B. Trathnigga (Univ. of Graz) o retenci amfifilních polymerů a oligomerů v různých modech kapalinové chromatografie. O vysokoúčinné analýze peptidů kapilární elektrochromatografii a kapalinovou chromatografií na nano-LC monolitických kolonách spojených s UV-fotometrickou a MS detekcí referoval A.R. Ivanov (Northeastern Univ., Boston).

V dalších sekcích zabývajících se aplikacemi chromatografických metod při analýze biologicky aktivních látek byly předneseny zajímavé příspěvky K.I. Ellera (Russian Acad. Med. Sci., Moscow) o aplikaci HPLC a GLC metod při kontrole deklarovaného složení potravin, W.W. Buchbergera (Keppler Univ., Linz) o výskytu farmakologicky aktivních látek v životním prostředí, E. Stashenkové (Univ. of Santander, Bucaramanga, Colombia) o stopové detekci pyrrolizidinových alkaloidů v potravinách vysokorozlišovací plynovou chromatografií s MS detekcí a F. Rupeze (Univ. S. Pablo, Madrid) o chromatografické analýze tokoferolů v různých biomatricích. Využití rybích nervových buněk jako nového in-line neurofyziologického detektoru pro HPLC separace rybích feromono-

nů předvedl I. Brondz (Univ. of Oslo), který svou přednášku věnoval doc. K. Mackovi, jednomu ze zakladatelů této série symposií, jež vznikla (pod názvem Biomedical Applications of Chromatography and Electrophoresis) již v 60. letech minulého století v Československu a jejíž poslední dějství se rovněž odehrávalo u nás, symposium SBS 2001 v Praze.

V závěrečné sekci byly prezentovány přehledné přednášky o aplikacích chromatografických a elektromigračních metod v bioseparacích, K.S. Boos (Maxmilian Univ., Munich) podal přehled o předseparacích biologických tekutin pro LC-MS analýzu nízkomolekulárních látek, B. Chankvetadze (Univ. of Tbilisi) hovořil o separacích enantiomerů kapilární elektroforézou a W.S. Hancock (Northeastern Univ., Boston) demonstroval detekci rakovinných biomarkerů z 10 000 buněk hmotnostní spektrometrií s iontovou pastí. Využití monolitických tenkovrstvých stacionárních fází pro separace biomolekul na základě tvorby biokomplementárních párů přiblížila T.B. Tennikova (Inst. Macromol. Compounds, Russian Acad. Sci., St. Petersburg). Nové aplikace kapilární micelární elektrokinetické chromatografie s on-line prekoncentrací vybraných složek při analýze metabolomu předvedl vynálezce této nejmladší chromatografické metody, S. Terabe (Univ. of Himeji, Japan). Vysoký aplikační potenciál kapalinové chromatografie a kapilární elektroforézy v genomice a proteomice dokumentoval v závěrečné

přednášce B. Karger (Northeastern Univ., Boston).

Celkem bylo na symposiu v 10 přednáškových sekcích prezentováno 30 hlavních přednášek, 40 kratších ústních sdělení a ve třech hojně navštívených sekcích plakátových sdělení bylo vystaveno a živě diskutováno téměř 300 posterů. Příspěvky pokrývaly širokou oblast teorie, metodiky, instrumentace a aplikace chromatografických metod a dalších příbuzných separačních metod. S úplným programem symposia je možné se seznámit na internetu: <http://alpha.ineos.ac.ru/sbs2003/>.

Při poměrně dlouhé době symposia (šest dní) bylo pro jeho účastníky příjemné, že celé symposium probíhalo ve velmi srdečné a přátelské atmosféře a s tradiční velkorysou ruskou pohostinností. Vědecký program symposia byl prokládán akcemi kulturního a společenského programu, kromě obvyklého uvítacího večírku a společenské večeře to byly mj. tři výlety po pamětihodnostech Moskvy a návštěva Obrazcovova loutkového divadla.

Celkově je možné symposium SBS 2003 hodnotit jako velmi vydařené a úspěšné pokračování této série symposií, které bylo důstojným příspěvkem k oslavám 100. výročí vynálezu chromatografie.

Příští symposium, SBS 2005, se bude konat v květnu nebo červnu 2005 v Utrechtu.

Václav Kašička,
Ústav organické chemie
a biochemie AV ČR, Praha

INFORMACE O SYMPOSIU ESBC 2003

Evropská společnost biochromatografie, European Society of BioChromatography, ESBC, pořádá ve dnech 27 – 29. 11. 2003 8th International Symposium on Polymer Designs for Bioseparation and Nanobiotechnology. Symposium se bude konat na Technické universitě v Compiègne

(70 km severně od Paříže). Vzhledem k poměrně nízkým poplatkům, 250 EUR (studenti 160 EUR), by toto symposium mohlo být dobře dostupné i pro účastníky z České republiky. Podrobnější údaje o symposiu jsou uvedeny na internetu:

<http://www.utc.fr/evenements/esbc2003>.

STATUT KOMISE PRO ETIKU VĚDECKÉ PRÁCE AKADEMIE VĚD ČR

I.

Základní ustanovení

1. Komise pro etiku vědecké práce (dále jen Komise) byla ustavena Vědeckou radou AV ČR dne 26. 9. 2002 v souladu s čl. 37 odst. f) Stanov Akademie věd ČR
2. Komise působí v rámci Akademie věd ČR a posuzuje otázky týkající se etiky vědecké práce. Ve svém postavení a jednání je autonomní. Komise nemá výkonnou pravomoc. O své činnosti podává jednou ročně zprávu Vědecké radě AV ČR a Akademické radě AV ČR.
3. Činnost Komise zajišťuje po technicko-administrativní stránce sekretariát Vědecké rady AV ČR.

II.

Složení

1. Počet členů Komise je nejméně 9 a nejvýše 12, alespoň tři členové nejsou pracovníky Akademie věd ČR. Složení Komise je pokud možno oborově vyvážené. Funkční období Komise je čtyřleté.
2. Členové Komise jsou osobnosti známé svojí vědeckou i osobní prestiží. Členství v Komisi je čestné a je neslučitelné s členstvím v Akademické radě AV ČR a s funkcí ředitele pracoviště Akademie věd ČR.
3. Členy Komise i jejího předsedu jmenuje předseda Vědecké rady AV ČR na základě tajné volby Vědeckou radou AV ČR. Předsedou Komise může být jen člen Vědecké rady AV ČR.
4. Tajemníka Komise, který nemusí být členem Komise, určí její předseda.

III.

Zásady činnosti

1. Komise zasedá podle potřeby, nejméně však dvakrát do roka. Zasedání svolává a řídí předseda Komise nebo jím pověřený člen Komise. Předseda je povinen Komisi svolat, požádají-li o to nejméně tři její členové.

2. Rozhodování komise hlasováním se řídí čl. 77 Stanov AV ČR.
 3. K jednání Komise mohou být přizvány zúčastněné osoby nebo odborní poradci.
 4. Komise projednává:
 - a) obecné a konkrétní otázky z oblasti etiky vědecké práce
 - b) podání, podněty a stížnosti pracovníků nebo vědeckých pracovišť AV ČR, které souvisejí s dodržováním etiky vědecké práce
 - c) výjimečně i podání jiných stran, pokud se dotýkají etiky vědecké práce v Akademii věd ČR.
 5. Jednotlivá podání posoudí Komise na svém nejbližším zasedání a rozhodne, zda se jimi bude dále zabývat.
 6. Komise se nezabývá podáními spojenými s morálním selháním jednotlivce nesouvisejícím s etikou vědecké práce.
 7. Komise se ke každému projednávanému podání písemně vyjádří.
 8. Vyjádření Komise bude zasláno předkladateli a podle povahy věci může být dáno na vědomí také:
 - a) dalším zúčastněným osobám
 - b) Akademické radě AV ČR
 - c) Vědecké radě AV ČR
 - d) příslušnému řediteli pracoviště AV ČR
 - e) příslušné vědecké radě pracoviště AV ČR.
- Komise může také zvážit způsob přiměřeného zveřejnění případu.

IV.

Závěrečná ustanovení

Tento statut byl projednán Komisí na zasedání dne 10. I. 2003, schválen Vědeckou radou AV ČR na jejím 10. zasedání dne 30. I. 2003 a tímto dnem nabývá účinnosti.



FEBS Advanced Course

Modern Techniques in Molecular Immunology (03-18)

Kiev, Ukraine, September 28 - October 3, 2003

Dear colleagues,

It is a great pleasure for us to invite you to participate at the FEBS Practical and Lecture Advanced Course "Modern Techniques in Molecular Immunology", which will take place at Palladin Institute of Biochemistry in Kiev, Ukraine, September 28 - October 3, 2003.

The programme of the Course comprises 5 days of lectures on different topics of modern methodologies in Immunology and in Molecular Biology as well as practical courses.

The Lecture Course will focus on:

introduction to recombinant phage antibody system; engineering of high affinity antibodies; therapeutic vaccines; modern approaches to gene targeting; cross-talk among immune receptors;

microanalysis of proteins and peptides by peptide mass fingerprint analysis; glycosylation of proteins: analysis and function in health and disease.

Among the lecturers who were kind to agree to participate in our Course are world known experts in their field of life sciences, as for example Professors: Klaus Rajewsky (Harvard Medical School, USA), Michael Sela and Israel Pecht (The Weizmann Institute, Israel), Ulf Hellman (Ludwig Institute for Cancer Research, Sweden), Raymond Mernaugh (Vanderbilt University, USA), Dr. Pauline Rudd (Oxford Glycobiology Institute, UK).

The aim of Practical Course is to provide hands-on experience in application of phage-display technique with a focus on recombinant phage antibody system design (RPAS) and will cover:

- general principles of phage antibodies libraries design with virtual modeling of essential steps and results;
- selection of antigen-specific phages from naive phage library;
- comparative measurement of phage specificity after each rounds of panning;
- characterization of protein expression pattern.

The Practical Course is limited to 16 participants. Practical courses participants will be selected on the basis of their CV and research background. It is expected that the course will be of particular interest for young researchers from the Former Soviet Union and Eastern and Central Europe. Students who are under 31 or within 5 years after PhD thesis and members of FEBS affiliated society are eligible to apply for FEBS Youth Travel Grant, which covers travel costs and registration fee of 360 euro (the latter includes also meals and housing).

The deadline for applications is June 15, 2003.

We would appreciate very much if you spread this information in your environments and help us to get the participants who would profit most from the outstanding lectures and scientific interactions we expect at the Course. To find more information about the Course and the application procedure please visit our website:

www.FEBSac-2003.kiev.ua

On behalf of the Organising Committee

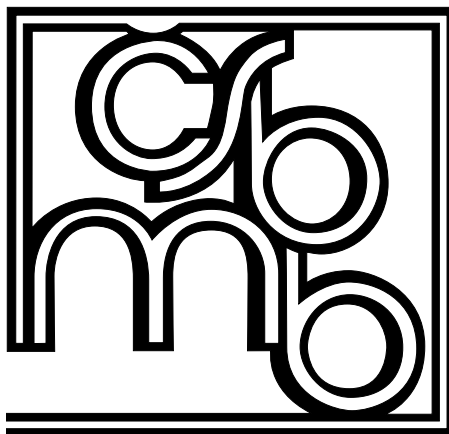
Dr. Ludmila Borisova

Palladin Institute of Biochemistry.

9 Leontovicha Street, 01601, Kiev, Ukraine

Tel: (380-44)-2341053, Fax: (380-44)-2296365, e-mail: febscourse@biochem.kiev.ua;

lborisova@biochem.kiev.ua



Central European Science Journals

w w w . c e s j . c o m

Central European Journal of Chemistry (CEJC) provides an international medium for the publication of research results and reviews in all areas of Chemistry. It has been established recently in order to enhance communication of best research done in Central and Eastern Europe to global scientific community, nevertheless, contributions from other regions of the world are by no means excluded. The journal is in electronic-only format and the language of the journal is English. We are kindly inviting you to visit the journal at <http://www.cesi.com/chemistry.html>.

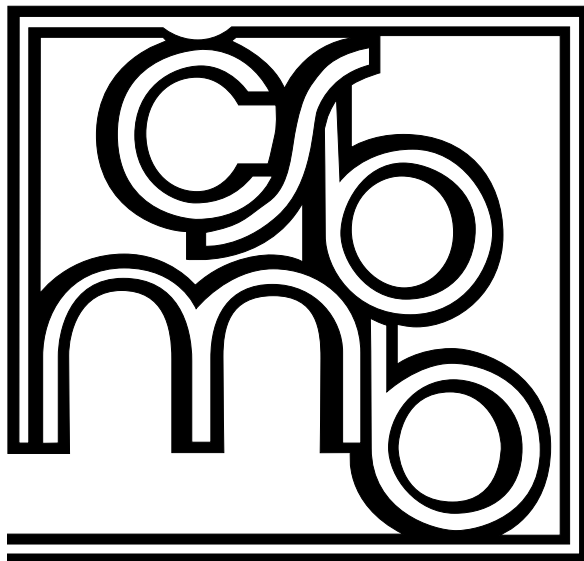
We know that there is one science. There is no Russian, French or American chemistry. However, there are local inefficiencies in communicating research results to scientists worldwide, resulting from yesterday's political isolation or today's financial misery of science in Central and Eastern Europe. Our target is to assist CEE authors by removing some of those inefficiencies. Some people say that there are too many scholarly journals already. We believe, however, that there is always space for journals that better meet needs of authors and readers than other journals. Our focus is on CEE authors. The benefits for our authors are as follows:

- first class editorial team
- careful, rapid and transparent peer review process - target three months
- advanced editorial assistance services - support in technical and language editing
- sophisticated promotional techniques
- benefits of e-publishing, including reference linking and multimedia attachments

Please, visit the Journal and get involved both as reader and author. You can find all necessary information on the Journal web page, including Call for Papers and the instructions for submitting papers at <http://www.cesi.com/submission.html>.

Dr. Aga Defratyka, Managing Editor
Central European Science Journals
– Warsaw

Dr. Jiri Damborsky, Editor
Masaryk University – Brno



Určeno pro vnitřní potřebu ČSBMB
Výkonný redaktor: Tomislav Barth ÚOCHB, AV ČR
tel.: 220 183 268
Vychází 3 x ročně

Sazba a tisk: grafické studio Venice Praha s.r.o.

Bulletin č. 2/2003 ze dne 13. 6. 2003

Evid. číslo: MK ČR E 10260

Toto číslo je hrazeno

Českou společností pro biochemii a molekulární biologii

ISSN 1211-2526

EMBL: <http://www.embl-heidelberg.de/>

EMBO: <http://www.embo.org/>

FEBS: <http://www.febs.unibe.ch/>

ČSBMB: <http://CSBMB.img.cas.cz/>