

CURRICULUM VITAE

Jméno, příjmení a

vědecká hodnost: doc. Mgr. Martin Kabeláč, Ph.D.

Datum narození: 21.5. 1971, Praha

Stav: svobodný

Současné zaměstnání: docent na Přírodovědecké fakultě Jihočeské Univerzity v Českých Budějovicích
e-mail: mkabelac@prf.jcu.cz

Vědecké zaměření:

- Molekulární simulace a modelování
- Povrchy volné a potenciální energie biomolekul
- Hydratace a solvatace biomolekul
- Ab initio výpočty biologických systémů

Vzdělání:

- 1989-1994 **Magisterské studium:** Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, katedra biochemie. Prospěl s vyznamenáním.
Diplomová práce na téma „Exploitation of UV-VIS Derivation Spectroscopy for Study of Conformational Changes of Proteins“, školitel RNDr. Jiří Hudeček, CsC.
- 1994-1999 **Postgraduální studium:** Ústav Fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského, AV ČR, Praha
Disertační práce „Structure and Interactions in DNA“, školitel Prof. Pavel Hobza, DrSc.
- 2013 jmenován docentem fyzikální chemie (habilitační řízení na Univerzitě Palackého v Olomouci)

PEDAGOGICKÁ ČINNOST:

1998-2004 Přednášející (s profesorem Pavlem Hobzou) předmětu Výpočetní a teoretické chemie (PřF UK). Jednosemestrální přednáška a cvičení v rozsahu 2/1 hodin týdně

2009 -dosud Přednášející předmětu Computational Chemistry (anglicky) pro studenty PřF JČU a Johannes Kepler University of Linz. Jednosemestrální přednáška a cvičení v rozsahu 2/1 hodin týdně.

2011- dosud Přednášející předmětu Fyzikální chemie II pro studenty PřF JČU. Jednosemestrální přednáška a cvičení v rozsahu 2/1 hodin týdně.

2014 -dosud Přednášející předmětu Chemická informatika pro studenty PřF JČU. Jednosemestrální přednáška a cvičení v rozsahu 1/1 hodina týdně.

2015- dosud Přednášející předmětu Fyzikální chemie I pro studenty PřF JČU. Jednosemestrální přednáška a cvičení v rozsahu 2/1 hodin týdně.

2015 - přednášející na Summer School in Molecular Biophysics and Systems Biology, Nové Hradky

VĚDECKÁ ČINNOST:

Vědecká kariéra včetně dlouhodobých zahraničních stáží:

1994-1999 postgraduální student na Ústavu Fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského , AV ČR, Praha

1999-2000 odborný pracovník na Ústavu Fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského , AV ČR, Praha

2001 1roční postdoc stáž v International Centre of Science and High Technology, Trieste, Itálie , školitel Prof. S. Miertus

2004 -2011 zaměstnanec Národního centra komplexních molekulárních systémů a biomolekul

2004- 2012 samostatný vědecký pracovník na Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR Praha

2010- 2012 odborný asistent na Přírodovědecké fakultě Jihočeské Univerzity v Českých Budějovicích (částečný úvazek)

2013-dosud docent na Přírodovědecké fakultě Jihočeské Univerzity v Českých Budějovicích (plný úvazek)

Ocenění:

2006 Prémie Otto Wichterleho GA AV pro mladé vědecké pracovníky

Řešitel tuzemských grantů:

2005-2008 Hlavní řešitel juniorského badatelského projektu „Vliv okolního prostředí (solvatace a hydratace) na stabilitu a geometrii komponent DNA“ (GA AV ČR, i.č. KJB400550518).

2008-2012 Hlavní řešitel standardního badatelského projektu „Hydratace a solvatace stavebních jednotek biopolymerů“ (GA AV ČR, i.č. IAA400550808).

2009-2011 spoluřešitel grantového projektu „Modelování hybridizace na DNA čípech v reálných podmínkách“ GA ČR i.č. (204/90/J010).

2013-dosud člen řešitelského týmu grantového projektu " Počítačové modelování interakcí organické hmoty a biomolekul s minerálními povrchy" GA ČR i.č. 13-08651S

Recenzní činnost:

Recenzní posudky pro časopisy *J.Phys. Chem.*, *ChemPhysChem*, *J. Comput. Chem.*

Oponent grantů GA ČR a GA UK

Spolupráce:

Prof. M.S. de Vries, University of Santa Barbara, USA

doc. J.Vacek, Palckého Univerzita, Olomouc, Česká republika

Dr. P. Hrouzek, Mikrobiologický ústav AV ČR, Třeboň, Česká republika

Prof. C. Cramer, University of Minnesota, USA

Dr. Jan Štorch, Ústav chemických procesů, Praha, Česká republika

Příspěvky na konferencích:

Zvané přednášky:

2010 5th ICCSMSE Conference , Corfu, Řecko

2011 1st Visegrad Symposium on Structural Systems Biology, Nové hrady

Aktivní účast (postery, přednášky) na dalších 23 mezinárodních konferencích

Seznam publikací:

Ligare, M.R, Rijs, A.M., Berden, G., Kabeláč, M., Nachtigallová, D., Oomens, J., de Vries, M.S.

Resonant Infrared Multiple Photon Dissociation Spectroscopy of Anionic Nucleotide Monophosphate Clusters

(2015) *Journal of Physical Chemistry* ., 119(25), pp. 7894-7901

Chval, Z., **Kabeláč, M.**, Burda, J.V.

Mechanism of the cis-[Pt(1 R,2 R -DACH)(H₂O)₂]²⁺ intrastrand binding to the double-stranded (pGpG)·(CpC) dinucleotide in aqueous solution: A computational DFT study

(2013) *Inorganic Chemistry* 52 (10), pp. 5801-5813

Kabeláč, M., Kroutil, O., Předota, M., Lankaš, F., Šíp, M.

Influence of a charged graphene surface on the orientation and conformation of covalently attached oligonucleotides: a molecular dynamics study

(2012) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14, pp.4217-4229.

Gengeliczki, Z., Callahan, M.P., **Kabeláč, M.** , Rijs, A.M., De Vries, M.S.

Structure of 2,4-diaminopyrimidine-theobromine alternate base pairs

(2011) *Journal of Physical Chemistry A*, 115 (41), pp. 11423-11427.

- Rijs, A.M., **Kabeláč, M.**, Abo-Riziq, A., Hobza, P., De Vries, M.S.
Isolated gramicidin peptides probed by IR spectroscopy
(2011) *ChemPhysChem*, 12 (10), pp. 1816-1821.
- Přenosil, O., Pitoňák, M., Sedlák, R., **Kabeláč, M.**, Hobza, P.
H-bonding cooperativity effects in amyloids: Quantum mechanical and molecular mechanics study
(2011) *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 225 (5), pp. 553-574.
- Kabeláč, M.**, Zimandl, F., Fessler, T., Chval, Z., Lankaš, F.
A comparative study of the binding of QS Y 21 and Rhodamine 6G fluorescence probes to DNA: Structure and dynamics
(2010) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12 (33), pp. 9677-9684.
- Kabeláč, M.**, Lankaš, F., Zimandl, F., Fessler, T.
Binding of QS Y 21 nonfluorescent quencher to DNA: Structure and dynamics
(2010) *ICNIT 2010 - 2010 International Conference on Networking and Information Technology*, art. no. 5508460, pp. 516-520.
- Kabeláč, M.**, Hobza, P., Špirko, V.
The ab initio assigning of the vibrational probing modes of tryptophan: Linear shifting of approximate anharmonic frequencies vs. multiplicative scaling of harmonic frequencies
(2009) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 11 (20), pp. 3921-3926.
- Zelený, T., Hobza, P., **Kabeláč, M.**
Microhydration of guanine...cytosine base pairs, a theoretical Study on the role of water in stability, structure and tautomeric equilibrium
(2009) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 11 (18), pp. 3430-3435.
- Černý, J., **Kabeláč, M.**, Hobza, P.
Double-helical → ladder structural transition in the B-DNA is induced by a loss of dispersion energy
(2008) *Journal of the American Chemical Society*, 130 (47), pp. 16055-16059.
- Kabeláč, M.**, Valdes, H., Sherer, E.C., Cramer, C.J., Hobza, P.
New MP2 database of nucleic acid base trimers: How well reproduce DFT methods structure and binding energies?
(2007) *AIP Conference Proceedings*, 963 (2), pp. 1244-1247.
- Kabeláč, M.**, Valdes, H., Sherer, E.C., Cramer, C.J., Hobza, P.
Benchmark RI-MP2 database of nucleic acid base trimers: Performance of different density functional models for prediction of structures and binding energies
(2007) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 9 (36), pp. 5000-5008.
- Abo-Riziq, A., Crews, B.O., Compagnon, I., Oomens, J., Meijer, G., Von Helden, G., **Kabeláč, M.**, Hobza, P., De Vries, M.S.
The mid-IR spectra of 9-ethyl guanine, guanosine, and 2-deoxyguanosine
(2007) *Journal of Physical Chemistry A*, 111 (31), pp. 7529-7536.
- Kabeláč, M.**, Sherer, E.C., Cramer, C.J., Hobza, P.
DNA base trimers: Empirical and quantum chemical ab initio calculations versus experiment in vacuo
(2007) *Chemistry - A European Journal*, 13 (7), pp. 2067-2077.
- Kabeláč, M.**, Hobza, P.
Hydration and stability of nucleic acid bases and base pairs
(2007) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 9 (8), pp. 903-917.
- Zendlová, L., Hobza, P., **Kabeláč, M.**
Stability of Nucleic Acid Base Pairs in Organic Solvents: Molecular Dynamics, Molecular Dynamics/Quenching, and Correlated Ab Initio Study
(2007) *J. Phys. Chem. B*, 111, pp. 2591-2609.
- Samoylova, E., Smith, V.R., Ritze, H.-H., Radloff, W., **Kabeláč, M.**, Schultz, T.
Ultrafast deactivation processes in aminopyridine clusters: Excitation energy dependence and isotope effects
(2006) *Journal of the American Chemical Society*, 128 (49), pp. 15652-15656.
- Kabeláč, M.**, Hobza, P.
Na⁺, Mg²⁺, and Zn²⁺ binding to all tautomers of adenine, cytosine, and thymine and the eight most stable keto/enol tautomers of guanine: A correlated ab initio quantum chemical study
(2006) *Journal of Physical Chemistry B*, 110 (29), pp. 14515-14523.
- Zendlová, L., Hobza, P., **Kabeláč, M.**
Potential energy surfaces of the microhydrated guanine cytosine base pair and its methylated analogue
(2006) *ChemPhysChem*, 7 (2), pp. 439-447.

- Bouř, P., Andrushchenko, V., **Kabeláč, M.**, Maharaj, V., Wieser, H.
Simulations of structure and vibrational spectra of deoxyoctanucleotides
(2005) *Journal of Physical Chemistry B*, 109 (43), pp. 20579-20587.
- Crews, B., Abo-Riziq, A., Grace, L., Callahan, M., **Kabeláč, M.**, Hobza, P., De Vries, M.S.
IR-UV double resonance spectroscopy of guanine-H₂O clusters
(2005) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 7 (16), pp. 3015-3020.
- Brauer, B., Gerber, R.B., **Kabeláč, M.**, Hobza, P., Bakker, J.M., Abo Riziq, A.G., De Vries, M.S.
Vibrational spectroscopy of the GC base pair: Experiment, harmonic and anharmonic calculations, and the nature of the anharmonic couplings
(2005) *Journal of Physical Chemistry A*, 109 (31), pp. 6974-6984.
- Kabeláč, M.**, Zendlová, L., Řeha, D., Hobza, P.
Potential energy surfaces of an adenine-thymine base pair and its methylated analogue in the presence of one and two water molecules: Molecular mechanics and correlated ab initio study
(2005) *Journal of Physical Chemistry B*, 109 (24), pp. 12206-12213.
- Rejnek, J., Hanus, M., **Kabeláč, M.**, Ryjáček, F., Hobza, P.
Correlated ab initio study of nucleic acid bases and their tautomers in the gas phase, in a microhydrated environment and in aqueous solution. Part 4. Uracil and thymine
(2005) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 7 (9), pp. 2006-2017.
- Hanus, M., **Kabeláč, M.**, Nachtigallová, D., Hobza, P.
Muagenic properties of 5-halogenuracils: Correlated quantum chemical ab initio study
(2005) *Biochemistry*, 44 (5), pp. 1701-1707.
- Abo-Riziq, A., Grace, L., Nir, E., **Kabeláč, M.**, Hobza, P., De Vries, M.S.
Photochemical selectivity in guanine-cytosine base-pair structures
(2005) *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 102 (1), pp. 20-23.
- Bakker, J.M., Compagnon, I., Meijer, G., Von Helden, G., **Kabeláč, M.**, Hobza, P., De Vries, M.S.
The mid-IR absorption spectrum of gas-phase clusters of the nucleobases guanine and cytosine
(2004) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 6 (10), pp. 2810-2815.
- Kabeláč, M.**, Plützer, Chr., Kleinermanns, K., Hobza, P.
Isomer selective IR experiments and correlated ab initio quantum chemical calculations support planar H-bonded structure of the 7-methyl adenine adenine and stacked structure of the 9-methyl adenine... adenine base pairs
(2004) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 6 (10), pp. 2781-2785.
- Hanus, M., **Kabeláč, M.**, Rejnek, J., Ryjáček, F., Hobza, P.
Correlated ab Initio Study of Nucleic Acid Bases and Their Tautomers in the Gas Phase, in a Microhydrated Environment, and in Aqueous Solution. Part 3. Adenine
(2004) *Journal of Physical Chemistry B*, 108 (6), pp. 2087-2097.
- Frečer, V., **Kabeláč, M.**, De Nardi, P., Priel, S., Miertuš, S.
Structure-based design of inhibitors of NS3 serine protease of hepatitis C virus
(2004) *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 22 (3), pp. 209-220.
- Hanus, M., Ryjáček, F., **Kabeláč, M.**, Kubař, T., Bogdan, T.V., Trygubenko, S.A., Hobza, P.
Correlated ab initio study of nucleic acid bases and their tautomers in the gas phase, in a microhydrated environment and in aqueous solution. Guanine: Surprising stabilization of rare tautomers in aqueous solution
(2003) *Journal of the American Chemical Society*, 125 (25), pp. 7678-7688.
- Řeha, D., **Kabeláč, M.**, Ryjáček, F., Šponer, J., Šponer, J.E., Elstner, M., Suhai, S., Hobza, P.
Intercalators. I. Nature of stacking interactions between intercalators (ethidium, daunomycin, ellipticine, and 4',6-diaminide-2-phenylindole) and DNA base pairs. Ab initio quantum chemical, density functional theory, and empirical potential study
(2002) *Journal of the American Chemical Society*, 124 (13), pp. 3366-3376.
- Kabeláč, M.**, Hobza, P.
Potential energy and free energy surfaces of all ten canonical and methylated nucleic acid base pairs: Molecular dynamics and quantum chemical ab initio studies
(2001) *Journal of Physical Chemistry B*, 105 (24), pp. 5804-5817.
- Kabeláč, M.**, Hobza, P.
At nonzero temperatures, stacked structures of methylated nucleic acid base pairs and microhydrated nonmethylated nucleic

acid base pairs are favored over planar hydrogen-bonded structures: A molecular dynamics simulations study
(2001) *Chemistry - A European Journal*, 7 (10), pp. 2067-2074.

Kabeláč, M., Ryjáček, F., Hobza, P.

Already two water molecules change planar H-bonded structures of the adenine···thymine base pair to the stacked ones: A molecular dynamics simulations study
(2000) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2 (21), pp. 4906-4909.

Kabeláč, M., Kratochvíl, M., Šponer, J., Hobza, P.

Structure energetics, vibrational frequencies and charge transfer of base pairs, nucleoside pairs, nucleotide pairs and B-DNA pairs of trinucleotides: Ab initio HF/MINI-1 and empirical force field study
(2000) *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 17 (6), pp. 1077-1086.

Schneider B, **Kabeláč, M.**

Stereochemistry of binding of metal cations and water to a phosphate group
(1998) *Journal of the American Chemical Society*, Volume: 120(1), pp 161-165

Hobza, P., **Kabeláč, M.**, Šponer, J., Mejzlík, P., Vondrášek, J.

Performance of empirical potentials (AMBER, CFF95, CVFF, CHARMM, OPLS, POLTEV), semiempirical quantum chemical methods (AM1, MNDO/M, PM3), and Ab initio Hartree-Fock method for interaction of DNA bases: Comparison with nonempirical beyond Hartree-Fock results
(1997) *Journal of Computational Chemistry*, 18 (9), pp. 1136-1150.

Schneider, B., **Kabeláč, M.**, Hobza, P.

Geometry of the phosphate group and its interactions with metal cations in crystals and ab initio calculations
(1996) *Journal of the American Chemical Society*, 118 (48), pp. 12207-12217.

Hobza, P., Hubálek, F., **Kabeláč, M.**, Mejzlík, P., Šponer, J., Vondrášek, J.

Ability of empirical potentials (AMBER, CHARMM, CVFF, OPLS, Poltev) and semi-empirical quantum chemical methods (AM1, MNDO/M, PM3) to describe H-bonding in DNA base pairs; comparison with ab initio results
(1996) *Chemical Physics Letters*, 257 (1-2), pp. 31-35.

Tesařová E., Gilar M., Hobza P., **Kabeláč, M.**, Deyl, Z., Smolková-Keulemansová E.

Correlation between structure of dihydropyridine calcium-antagonists and their retention behavior and enantioseparation on the beta-cyclodextrin stationary phase in HPLC
(1995) *Journal of High Resolution Chromatography*, 18(9), pp. 597-601.