

**Průběžná výroční zpráva projektu specifického výzkumu
zakázka č. 2102/2022**

Název projektu: Heteroaromatické molekuly ovlivňující lidské enzymy

Specifikace řešitelského týmu

Odpovědný řešitel: Mgr. Karolína Knittelová, prof. PharmDr. Kamil Musílek, Ph.D.

Studenti doktorského studia na UHK: Mgr. Karolína Knittelová, Mgr. Zuzana Kohoutová, Mgr. Eliška Prchalová, Mgr. Petra Lišková (ukončila studium v srpnu 2022), Mgr. Radomír Jůza

Studenti magisterského studia na PřF UHK: Bc. Michaela Dohnalová, Bc. Eliška Hančová, Bc. Tereza Hofmanová, Bc. Eliška Horáková, Bc. Tereza Langerová, Bc. Zdeňka Neuerová, Bc. Denisa Nosková, Bc. Gabriela Nosková, Bc. Lucie Odstrčilová, Bc. Lukáš Fresser, Bc. Barbora Křížová, Bc. Sára Rademacherová

Další výzkumní pracovníci: PharmDr. Rudolf Andrýs, Ph.D., RNDr. Dávid Maliňák, PhD., prof. PharmDr. Kamil Musílek, Ph.D., RNDr. Miroslav Psotka, PhD., PharmDr. Adam Skarka, Ph.D., Ing. Jana Svobodová, Ph.D.

Celková částka přidělené dotace: 674 380,00 Kč

Stručný popis postupu při řešení projektu (max. 2 strany).

Projekt specifického výzkumu byl zaměřen na zkoumání heteroaromatických molekul, které mají schopnost ovlivňovat lidské enzymy. Nejvíce studovaným enzymem byly lidská cholinesterasa, a to konkrétně její dva druhy – acetylcholinesterasa (AChE) a butyrylcholinesterasa (BChE). AChE štěpí acetylcholin, BChE, je nespecifická esterasa štěpící přírodní i uměle připravené esterové molekuly. Tyto enzymy mohou být různě inhibovány, například organofosforovými sloučeninami (OP). Aktivita enzymu může být obnovena po podání tzv. reaktivátorů. Nejznámější, a v lékařské praxi používané, AChE reaktivátory jsou pralidoxim (2-PAM), obidoxim (LüH-6) a asoxim (HI-6). Společným znakem pro tyto sloučeniny je přítomnost heteroaromatického kruhu, oximové části molekuly a trvale kladného náboje.

V rámci projektu byly připraveny nové heteroaromatické molekuly, které byly navrženy na základě struktur již známých reaktivátorů cholinesteras. Nové sloučeniny byly připraveny a přečištěny pomocí metod organické chemie. Struktura a čistota připravených molekul byla stanovena pomocí ^1H a ^{13}C NMR a potvrzena analytickou metodou HPLC-MS. Pro přesné určení molekulové hmotnosti byla použita HRMS analýza. U sloučenin izolovaných jako pevné látky byla změřena teplota tání. Rozpustnost (mg/ml; logS) byla stanovena pomocí nefelometrického stanovení. Stabilita nově připravených molekul byla měřena po inkubaci v různých systémech voda/pufr/lidská plazma. Měření pK_a bylo provedeno spektrofotometricky pomocí pufru daného pH v rozsahu 3-12 a hodnoty pKa byly vypočteny ze závislosti absorbance disociované formy látky na hodnotě pH.

Po základní charakteristice fyzikálně-chemických vlastností nových heteroaromatických molekul jsme přistoupili k *in vitro* testování. Byly změřeny hodnoty IC_{50} pro studované cholinesterasy, byl proveden reaktivitační screening a studována reaktivitační kinetika. Aktivita enzymů byla sledována pomocí modifikované Ellmanovy metody. Výsledky *in vitro* testování byly srovnávány se standardy známých reaktivátorů cholinesteras (2-PAM, LüH-6, HI-6). Výsledky pak byly použity pro studium vztahů mezi strukturou a aktivitou pro nově připravené molekuly.

Diplomové práce studentů pracujících na projektu byly zaměřeny na organickou syntézu nebo analytický výzkum heteroaromatických molekul a v roce 2022 byla úspěšně obhájena většina prací (8), u poslední diplomové práce předpokládáme obhajobu v červnu 2023.

Splnění cílů řešení a přínos projektu.

Cíle projektu byly částečně splněny. Úspěšně byla syntetizována série heteroaromatických molekul, byla provedena jejich analýza a testování jejich aktivity. Byla provedena studie na heteroaromatické molekuly a jejich ovlivňování aktivity lidského enzymu cholinesterasy. Diplomové práce studentů pracujících na projektu byly úspěšně obhájeny, výsledky studie se zaměřením na cholinesterasy budou postupně zaslány k publikaci do impaktovaných časopisů.

Přínosem projektu je syntéza nových molekul, jejich charakteristika fyzikálně-chemických vlastností a *in vitro* stanovení inhibiční a reaktivacní aktivity. Porovnání vztahů mezi strukturou a aktivitou je přínosné pro design dalších molekul, které tak můžou různým způsobem modulovat aktivitu vybraných enzymů.

Splnění kontrolovatelných výsledků řešení.

Uveďte jen výstupy, které vznikly na základě řešení tohoto projektu. Dále uveďte, zda byly publikace skutečně zadány do OBD s vazbou na RIV. U výstupů Jimp a Jsc uveďte do závorky plánovaný a skutečný kvartil časopisu.

Publikované články v časopisech typu Jimp (studenti zvýraznění):

Juza, R.; Musilek, K.; Mezeiova, E.; Soukup, O.; Korabecny, J. Recent Advances in Dopamine D2 Receptor Modulators in the Treatment of Neuropsychiatric Disorders. *Medicinal Research Reviews*. 2023, vol. 43, no. 1, p. 55-211. <https://doi.org/10.1002/med.21923> IF₂₀₂₁ = 12.388 (Jimp WoS D1/Q1 2/72 Medicinal Chemistry, D1/Q1 12/361 Pharmacology & Pharmacy)

Články připravované do časopisů typu Jimp (studenti zvýraznění):

Vishakantegowda, A.G.; Andrys, R.; Jonczyk, J.; Oh, E.H.; Chrienova, Z.; Malinak, D.; Prchalova, E.; Skarka, A.; Schmidt, M.; Latka, K.; Malawska, B.; Jung, Y.-S.; Bajda, M.; Musilek, K. Virtually identified 5-substituted pyridinium oximes are excellent reactivators of NEMP inhibited acetylcholinesterasy. *ACS Medicinal Chemistry Letters*, under preparation. (Jimp WoS Q1 11/72 Medicinal Chemistry)

Kozlov, O.; Horakova, E.; Rademacherova, S.; Malinak, D.; Andrys, R.; Prchalova, E.; Lisa, M. Direct Chiral Supercritical Fluid Chromatography – Mass Spectrometry Analysis of Mono- And Diacylglycerol Isomers for the Study of Lipase-Catalyzed Hydrolysis of Triacylglycerols. *Analytical Chemistry*, under preparation. (Jimp WoS D1/Q1 7/99 Analytical Chemistry)

Knittelova, K.; Malinak, D.; Musilek, K. Monocharged pyridinium oximes with electron affecting moiety are able to increase reactivation of cholinesterases inhibited by nerve agent surrogates, under preparation.

Kohoutova, Z.; Malinak, D.; Musilek, K. Structure-activity relationship for reactivators of butyrylcholinesterase inhibited by organophosphorous compounds, under preparation.

Prchalova, E.; Malinak, D.; Musilek, K. Delivery systems used for oxime reactivators of acetylcholinesterase in blood-brain barrier penetration, under preparation.

Prezentované práce (studenti zvýraznění):

K. Knittelova, D. Malinak, R. Andrys, and K. Musilek, "NOVEL MODIFIED PRALIDOXIME DERIVATES AS POTENTIAL REACTIVATORS OF ORGANOPHOSPHATE-INHIBITED CHOLINESTERASES," the 27th Interdisciplinary Toxicology Conference, TOXCON 2022 Hradec Králové 29.8–1.9. 2022, MMSL 91 (Suppl.1), 43 (2022).

Z. Kohoutova, D. Malinak, T. Hofmanova, R. Andrys, L. Prchal, J. Svobodova, and K. Musilek, "SYNTHESIS AND IN VITRO EVALUATION OF NON-SYMMETRICAL MONOQUATERNARY AMMONIUM SALTS AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES," the 27th Interdisciplinary Toxicology Conference, TOXCON 2022 Hradec Králové 29.8–1.9. 2022, MMSL 91 (Suppl.1), 44 (2022).

E. Prchalova, D. Malinak, J. Svobodova, **L. Fresser**, R. Andrys, Z. Heger, and K. Musilek, "IN VITRO EVALUATION OF BODIPY LABELED BISQUATERNARY AMONIUM SALTS USED AS REACTIVATORS OF INHIBITED ACETYLCHOLINESTERASE," the 27th Interdisciplinary Toxicology Conference, TOXCON 2022 Hradec Králové 29.8–1.9. 2022, MMSL 91 (Suppl.1), 65 (2022).

K. Knittelova, D. Malinak, R. Andrys, K. Musilek, Novel modified pralidoxime derivates as potential reactivators of organophosphate inhibited cholinesterases, 74. sjezd chemikov, Olomouc 4.-7.9.2022, Czech Chem. Soc. Symp. Ser. 20, 179–314 (2022). poster 4P-04

Z. Kohoutova, D. Malinak, **T. Hofmanova**, R. Andrys, L. Prchal, J. Svobodova, K. Musilek, Synthesis and in vitro evaluation of nonsymmetrical monoquaternary ammonium salts as potential reactivators of inhibited cholinesterases, 74. sjezd chemikov, Olomouc 4.-7.9.2022, Czech Chem. Soc. Symp. Ser. 20, 179–314 (2022). poster 4P-05

E. Prchalova, D. Malinak, J. Svobodova, **L. Fresser**, R. Andrys, Z. Heger, K. Musilek, In vitro evaluation of bodipy labeled bisquaternary amonium salts used as reactivators of inhibited acetylcholinesterase, 74. sjezd chemikov, Olomouc 4.-7.9.2022, Czech Chem. Soc. Symp. Ser. 20, 179–314 (2022). poster 4P-11

K. Knittelova, D. Malinak, R. Andrys, K. Musilek, Substitution on pralidoxime affects its reactivation activity to organophosphate inhibited cholinesterases, 14th International Meeting on Cholinesterases and the 8th International Conference on Paraoxonases (ChePon2022), Boloňa Itálie 18.9-21.9. 2022, Abstract book, p. 76., poster 19

Z. Kohoutova, D. Malinak, **T. Hofmanova**, R. Andrys, L. Prchal, J. Svobodova, K. Musilek, Synthesis and in vitro evaluation of monoquaternary analogues of oxime K203 as potential reactivators of inhibited cholinesterases, 14th International Meeting on Cholinesterases and the 8th International Conference on Paraoxonases (ChePon2022), Boloňa Itálie 18.9-21.9. 2022, Abstract book, p. 77., poster 20

E. Prchalova, D. Malinak, J. Svobodova, **L. Fresser**, R. Andrys, Z. Heger, K. Musilek, In vitro evaluation of BODIPY labelled oxime reactivators of acetylcholinesterases, 14th International Meeting on Cholinesterases and the 8th International Conference on Paraoxonases (ChePon2022), Boloňa Itálie 18.9-21.9. 2022, Abstract book, p. 69., poster 12

Tab. 1 Sumář výstupů řešení projektu

Typ výstupu	Plán	Skutečnost	Poznámka
Jimp (databáze WoS)*	4	1 (D1/Q1)	5× Jimp (Q1-Q2 dle WOS) v přípravě
Jsc (databáze Scopus)			
B (recenzovaná odborná kniha) **			
C (kapitola v recenzované odborné knize)**			
D (článek ve sborníku ve WoS, Scopus)			
P (patent)			
Počet obhájených dizertačních prací			
Počet obhájených diplomových prací	9	8	1 obhajoba proběhne v červnu 2023
Počet výsledků	13	9	

* Povinný výstup.

** Pouze renomovaná nakladatelství Elsevier, Springer, Bentham apod.

Výsledek čerpání rozpočtu:

a) Spotřeba materiálu (položka dle IS Magion č. 501):

Materiálové náklady (nutno soutěžit v rámci DNS)	Stručné zdůvodnění nákupu	Přesná specifikace	Cena včetně DPH (Kč)
Magnetická míchačka s ohřevem	Míchání a zahřívání chemických reakcí	viz DNS	45645

Spotřební náklady	Stručné zdůvodnění nákupu	Cena včetně DPH (Kč)
Kancelářské potřeby	Drobné kancelářské potřeby (př. laboratorní deníky, štítky, ad.)	2684,12
Laboratorní sklo, rozpouštědla, chemikálie, spotřební materiál	Materiál pro syntézu, analýzu a testování sloučenin	318560,55
celkem		321244,67

b) Cestovné (položka dle IS Magion č. 512):

cestovné zaměstnanců a jeho stručné zdůvodnění;

Titul, jméno a příjmení zaměstnance	Ubytování (cca Kč)	Cestovné (cca Kč)	Stravné (cca Kč)	Celkem (Kč)	(Název, místo a datum konání)
Mgr. Knittelová, Mgr. Kohoutová, Mgr. Prchalová	-	12861	-	12861	14th International Meeting on Cholinesterases and the 8th International Conference on Paraoxonases (ChePon2022), Boloňa Itálie, 18.09-21.09. 2022
Mgr. Knittelová, Mgr. Kohoutová, Mgr. Prchalová		5145		5145	74. sjezd chemiků, Olomouc, 4.9.-7.9.22
Mgr. Hofmanová, Mgr. Langerová, Mgr. Neuerová		1926		1926	23. Škola hmotnostní spektrometrie, Srní, 5.9.-9.9.22
celkem				19932	

c) **Ostatní služby** (položka dle IS Magion č. 518):
náklady nebo výdaje na služby a jejich stručné zdůvodnění

Typ služby	Stručné zdůvodnění služby	Cena včetně DPH (Kč)
Poplatky konference, semináře, kurzy DU	výjezdy PhD studentů na konference	97020,20
Licence GraphPad Prism 9 2 ks	Chemický software	47558
Licence ChemDraw Prime 2 ks	Chemický software	41986
Tisk posterů	prezentace výsledků na konferencích studenty	3150
Strav. a ubyt. tuzemsko na fakturu	stravné a ubytování PhD studentů na konferencích	21070
		210664,20

d) **Mzdové náklady** (položka dle IS Magion č. 521):

Titul, jméno a příjmení	Odměna (Kč)	Zdůvodnění	Celkem (Kč)
-	-	-	-

e) **Zákonné pojištění** (položka dle IS Magion č. 524):

Titul, jméno a příjmení	Odvody z odměn 34,52 % (Kč)	Celkem (Kč)
-	-	-

f) **Kurzové ztráty** (položka dle IS Magion č. 545):

Kurzové ztráty	Celkem (Kč)
Kurzové ztráty v rámci plateb do zahraničí	3103,34

g) **Jiné ostatní náklady** (položka dle IS Magion č. 549):
zejména **stipendia** a jejich stručné zdůvodnění

Bankovní poplatky	Celkem (Kč)
Bankovní poplatky v rámci plateb do zahraničí	240,86

Stipendium studentů za práci na řešení projektu

Titul, jméno a příjmení studenta/ky	Číslo studenta/ky	Typ studia (Mgr./PhD.) / ročník studia	Obor studia	Stipendium (Kč)
Mgr. Karolína Knittelová	S21CH002DP	Ph.D./1	P0512D130007	8000
Mgr. Zuzana Kohoutová	S20CH003DP	Ph.D./2	P0512D130007	8000
Mgr. Eliška Prchalová	S20CH004DP	Ph.D./2.	P0512D130007	8000
Mgr. Petra Lišková	S20CH002DK	Ph.D./2.	P0512D130007	8000
Bc. Lukáš Fresser	S21CH011NP	Mgr./1.	N0531A13CZTX	2000
Bc. Barbora Křížová	S21CH016NP	Mgr./1.	N0531A13CZTX	2000
Bc. Sára Rademacherová	S21CH017NP	Mgr./1.	N0531A13CZTX	2000
celkem				38000

Cestovní stipendia studentů	Celkem (Kč)
Cestovní stipendia PhD studentů	35976,00

Výsledek čerpání finančních prostředků uveďte v jednotné přehledné tabulce 2.

Tab. 2 Čerpání finančních prostředků v Kč

Položka magionu	Položka	Plán Kč	Žádost o změnu	Skutečnost	Poznámka
	Počet členů řešitelského týmu čerpajících mzdové prostředky	0		0	
	Počet studentů čerpajících mzdové prostředky	7		7	
501	Spotřeba materiálu DHIM	492080	-125190,33	366889,67	Software byl nesprávně zaúčtován jako služba, cestovné studentů bylo navýšeno vzhledem k navýšení cen
512	Cestovné	0	+19932	19932	Nesprávně zaúčtované cestovné studentů
518	Ostatní služby	0	+210664,2	210664,2	Část cestovních výdajů studentů a software byly účtovány jako služba
521	Mzdové náklady	0		0	
524	Zákonné pojištění	0		0	
545	Kurzové ztráty	0	+3103,34	3103,34	Kurzové ztráty z důvodu zahraničních plateb
549	Jiné ostatní náklady (stipendia)	182300	-108083,14	74216,86	Část cestovních výdajů studentů byla účtována jako služba
*	přeúčtování na zak. 1000/04450			-426,07	
	Celkové náklady	674380		674380	

Ke zprávě přiložte:

- a) výpis z OBD – výstupy podpořené tímto projektem,
- b) výsledovku z ekonomického informačního systému Magion – vyúčtování dotace.

Datum: 9. 1. 2023 Podpis odpovědného řešitele:

* V případě potřeby přidejte další řádky s položkami dle IS Magion.

Export záznamu

[1]Jůza, R., Musílek, K., Mezeiova, E., Soukup, O., Korabecny, J. (2023). Recent advances in dopamine D2 receptor ligands in the treatment of neuropsychiatric disorders. *Medicinal Research Reviews*, 43(1), 55-211.

Výsledovka s očekávanými náklady

Pohyby za období 01 - 12 / 2022

Pracoviště:	*****	Všechny vybrané analytiky
Činnost:	****	Všechny vybrané analytiky
Fullcost:	*****	Všechny vybrané analytiky
Zakázka:	2102	SV Heteroaromatické molekuly ovl. lidské
Podzakázka:	***	Všechny podzakázky

Účet	Název účtu	Má dátí	Dal	Zůstatek
501 003	Spotřeba materiálu kancelářské DU			
Počáteční stav		0,00		
ZAV/0411/00185/22	31.03.2022	2 018,62	0,00 kancelářské potřeby	
ZAV/0411/00218/22	13.04.2022	665,50	0,00 kancelářské potřeby	
501 003	Spotřeba materiálu kancelářské D	2 684,12	0,00	2 684,12
501 008	Spotřeba materiálu DHIM DU			
Počáteční stav		0,00		
MAJ/0407/00026/22	27.09.2022	22 823,00	0,00 Majetek 03- odpisy jednorázový 09 - DH-P 00023258	
MAJ/0407/00026/22	27.09.2022	22 822,00	0,00 Majetek 03- odpisy jednorázový 09 - DH-P 00023257	
501 008	Spotřeba materiálu DHIM DU	45 645,00	0,00	45 645,00
501 099	Spotřeba materiálu ostatní DU			
Počáteční stav		0,00		
ZAV/0411/00194/22	05.04.2022	14 157,00	0,00 materiál -safelock 1000 ksQuality™, 0,1 – 10 µL,	
ZAV/0411/00224/22	19.04.2022	3 342,62	0,00 93100 Tissue culture dish O 100 mm, 240 pieces	
ZAV/0411/00224/22	19.04.2022	22 246,46	0,00 90025 Tissue culture flask 25 cm ² / vent screw cap	
ZAV/0411/00239/22	25.04.2022	17 859,60	0,00 spotřební materiál - eppendorfQuality™, 0,1 – 10	
ZAV/0411/00377/22	09.06.2022	9 934,10	0,00 chemikálie Immobilon-PSQ, 26.5cm x 1.875m roll	
ZAV/0411/00386/22	14.06.2022	3 025,00	0,00 chemikálie	
ZAV/0411/00399/22	20.06.2022	2 057,00	0,00 spotřební zboží	
ZAV/0411/00439/22	07.07.2022	1 668,59	0,00 chemikálie 1,4-Diazabicyclo[2.2.2]octane	
ZAV/0411/00476/22	18.07.2022	2 425,12	0,00 tlakové láhve27 KG + poplatky	
ZAV/0411/00525/22	02.08.2022	1 536,70	0,00 materiál - eppendorfk	
ZAV/0411/00538/22	08.08.2022	15 064,50	0,00 materiál - špičky, zkumavky	
ZAV/0411/00546/22	09.08.2022	5 011,46	0,00 materiál - zkumavky	
ZAV/0411/00549/22	09.08.2022	23 377,20	0,00 rozpouštědlačistota min. 99,0%, balení o objemu	
ZAV/0411/00556/22	10.08.2022	4 737,15	0,00 materiál - zkumavky	
ZAV/0411/00559/22	15.08.2022	17 303,00	0,00 483745-500G - spotřební materiálSodium	
ZAV/0411/00614/22	06.09.2022	11 543,40	0,00 spotřební materiál - vialkyzesíleným okrajem a v	
ZAV/0411/00669/22	20.09.2022	8 324,80	0,00 materiál - DI-TERT-BUTYL DICARBONATE	
ZAV/0411/00670/22	20.09.2022	12 938,53	0,00 materiál - baňky, nálevky, kádinky, ...	
ZAV/0411/00683/22	26.09.2022	2 891,90	0,00 Zinc iodide 50 g	
ZAV/0411/00729/22	12.10.2022	9 147,60	0,00 materiál - zkumavky	
ZAV/0411/00742/22	18.10.2022	12 840,47	0,00 materiál - nálevky, lahve, parafilmy, ...	
ZAV/0411/00752/22	19.10.2022	2 891,90	0,00 materiál - VIAL	
ZAV/0411/00796/22	01.11.2022	7 737,95	0,00 materiál - jehly, stříkačky, utěrky	
ZAV/0411/00798/22	02.11.2022	29 125,91	0,00 materiál - zátky, nálevky, baňky, ...	
ZAV/0411/00819/22	08.11.2022	26 015,00	0,00 materiál - vialky, pipety	
ZAV/0411/00821/22	08.11.2022	11 461,12	0,00 rozpouštědlačistota min. 99,0%, balení o objemu	
ZAV/0411/00840/22	15.11.2022	601,00	0,00 skleněná kapátka z tmavého skla 50kskapátkem a	
ZAV/0411/00848/22	15.11.2022	16 873,45	0,00 materiál - hadice, jehly, vialkyzelená krátká"	
ZAV/0411/00850/22	15.11.2022	737,20	0,00 Balónek na pipety, standardní model (krátký model)	
ZAV/0411/00858/22	18.11.2022	10 047,32	0,00 spotřební materiálROYAL IMPERIAL GR	
ZAV/0411/00906/22	29.11.2022	1 103,52	0,00 materiál - Nálevka dělící 500	
ZAV/0411/00974/22	13.12.2022	2 401,85	0,00 materiál - Nálevka dělící 1000	
ZAV/0411/01027/22	28.12.2022	2 511,83	0,00 spotřební materiálROYAL IMPERIAL GR	

Výsledovka s očekávanými náklady
Pohyby za období 01 - 12 / 2022

Pracoviště:	*****	Všechny vybrané analytiky		
Činnost:	****	Všechny vybrané analytiky		
Fullcost:	*****	Všechny vybrané analytiky		
Zakázka:	2102	SV Heteroaromatické molekuly ovl. lidské		
Podzakázka:	***	Všechny podzakázky		
Účet	Název účtu	Má dátí	Dal	Zůstatek
501 099	Spotřeba materiálu ostatní DU			
Počáteční stav		0,00		
ZAV/0411/01031/22	02.01.2023	919,60	0,00 rozpouštědla	
ZAV/0414/00143/22	13.12.2022	3 884,80	0,00 chemikálie[3.2.1]octane, 95%	
ZAV/0414/00143/22	13.12.2022	815,90	0,00 DPH chemikálie	
501 099	Spotřeba materiálu ostatní DU	318 560,55	0,00	318 560,55
501	Spotřeba materiálu	366 889,67	0,00	366 889,67
512 001	Cestovné zahraniční zaměstnanci DU			
Počáteční stav		0,00		
ZAV/0411/00429/22	29.06.2022	4 287,00	0,00 Praha - Bologna - Praha - Knittelová	
ZAV/0411/00429/22	29.06.2022	4 287,00	0,00 Praha - Bologna - Praha - Prchalová	
ZAV/0411/00429/22	29.06.2022	4 287,00	0,00 Praha - Bologna - Praha - Kohoutová	
512 001	Cestovné zahraniční zaměstnanci	12 861,00	0,00	12 861,00
512 002	Cestovné tuzemské zaměst DU			
Počáteční stav		0,00		
CES/0401/00239/22	15.09.2022	3 859,00	0,00 Kohoutová,CZ,,04.09.22-07.09.22	
CES/0401/00241/22	15.09.2022	643,00	0,00 Knittelová,CZ,,04.09.22-07.09.22	
CES/0401/00242/22	15.09.2022	643,00	0,00 Prchalová,CZ,,04.09.22-07.09.22	
CES/0401/00245/22	15.09.2022	642,00	0,00 Langerová,CZ,,05.09.22-09.09.22	
CES/0401/00246/22	15.09.2022	642,00	0,00 Hofmanová,CZ,,05.09.22-09.09.22	
CES/0401/00248/22	27.09.2022	642,00	0,00 Neuerová,CZ,,05.09.22-09.09.22	
512 002	Cestovné tuzemské zaměst DU	7 071,00	0,00	7 071,00
512	Cestovné	19 932,00	0,00	19 932,00
518 004	Poplatky konference, semináře, kurzy DU			
Počáteční stav		0,00		
ZAV/0411/00426/22	29.06.2022	11 320,00	0,00 ŠKOLA MS 2022 - Tereza Hofmanová - ID201	
ZAV/0416/00036/22	29.06.2022	9 644,70	0,00 konf. popl. Kohoutová s cestouKohoutová	
ZAV/0416/00037/22	29.06.2022	9 642,75	0,00 reg. popul. s cestou KnittelováKnittelová	
ZAV/0416/00038/22	29.06.2022	9 642,75	0,00 konf. popul. Mgr. Eliška s cestou	
ZAV/0416/00047/22	01.08.2022	5 300,00	0,00 Registrační poplatek Prchalová ČRPrchalová	
ZAV/0416/00048/22	01.08.2022	5 300,00	0,00 Registrační poplatek Kohoutová ČRKohoutová	
ZAV/0416/00051/22	10.08.2022	5 300,00	0,00 Registrační poplatek Knitelová ČRKnitelová	
ZAV/0416/00065/22	12.09.2022	7 800,00	0,00 konferenční poplatek Knittelová ČROlomouci - Mgr	
ZAV/0416/00069/22	23.09.2022	11 320,00	0,00 konf. popul. Neuerová	
ZAV/0416/00070/22	23.09.2022	5 250,00	0,00 vložné -ŠKOLA MS 2022 - Tereza Langerová - ČR200	
ZAV/0416/00070/22	23.09.2022	900,00	0,00 kurzovné Langerová ČR	
ZAV/0416/00074/22	03.10.2022	7 800,00	0,00 účastnický poplatek Prchalová ČRregistrace na 74	
ZAV/0416/00076/22	11.10.2022	7 800,00	0,00 vložné Kohoutová ČRregistrace na 74. Sjezd chemi	
518 004	Poplatky konference, semináře, kú	97 020,20	0,00	97 020,20

Výsledovka s očekávanými náklady
Pohyby za období 01 - 12 / 2022

Pracoviště:	*****	Všechny vybrané analytiky
Činnost:	****	Všechny vybrané analytiky
Fullcost:	*****	Všechny vybrané analytiky
Zakázka:	2102	SV Heteroaromatické molekuly ovl. lidské
Podzakázka:	***	Všechny podzakázky

Účet	Název účtu	Má dátí	Dal	Zůstatek
518 008	Ostatní služby - SW licence, aktual. DU			
Počáteční stav		0,00		
MAJ/0407/00012/22	17.06.2022	23 779,00	0,00 Majetek 03- odpisy jednorázový 06 - DN 00001918 SW	
MAJ/0407/00012/22	17.06.2022	23 779,00	0,00 Majetek 03- odpisy jednorázový 06 - DN 00001917 SW	
MAJ/0407/00042/22	25.11.2022	20 933,00	0,00 Majetek 03- odpisy jednorázový 11 - DN 00001928 SW	
MAJ/0407/00042/22	25.11.2022	20 933,00	0,00 Majetek 03- odpisy jednorázový 11 - DN 00001929 SW	
518 008	Ostatní služby - SW licence, aktuā	89 424,00	0,00	89 424,00
518 009	Služby - tisk, graf.práce DU			
Počáteční stav		0,00		
POK/0492/00055/22	05.09.2022	3 150,00	0,00 tisk posterů na plátno-3x	
518 009	Služby - tisk, graf.práce DU	3 150,00	0,00	3 150,00
518 067	Strav. a ubyt..tuzemsko na fakturu DU			
Počáteční stav		0,00		
ZAV/0411/00688/22	26.09.2022	8 400,00	0,00 ubytování Mgr. Kohoutová	
ZAV/0411/00689/22	26.09.2022	7 500,00	0,00 ubytování Mgr. Prchalová	
ZAV/0416/00070/22	23.09.2022	5 170,00	0,00 ubytování + stravování	
518 067	Strav. a ubyt..tuzemsko na fakturu	21 070,00	0,00	21 070,00
518	Ostatní služby	210 664,20	0,00	210 664,20
545 001	Kurzové ztráty DU			
Počáteční stav		0,00		
BAN/0802/16285/22	14.06.2022	2 274,30	0,00 0000000000 SW - neomezená	
BAN/0802/34575/22	14.12.2022	102,08	0,00 0000000000 chemikálie	
ZAV/0416/00036/22	29.06.2022	241,02	0,00 0000000000 registrace na konferenci Mgr. Zuzana Ko	
ZAV/0416/00037/22	29.06.2022	242,97	0,00 0000000000 registrace na konferenci Mgr. Karolína	
ZAV/0416/00038/22	29.06.2022	242,97	0,00 0000000000 registrace na konferenci Mgr. Eliška	
545 001	Kurzové ztráty DU	3 103,34	0,00	3 103,34
545	Kurzové ztráty	3 103,34	0,00	3 103,34
549 003	Bankovní poplatky DU			
Počáteční stav		0,00		
BAN/0802/16284/22	14.06.2022	180,00	0,00 0000000000 POPLATKY FUNDS TRA	
BAN/0802/16306/22	14.06.2022	60,86	0,00 0000000000 DEBETNÍ TRANS.FUND	
549 003	Bankovní poplatky DU	240,86	0,00	240,86
549 006	Jiné ostatní náklady mimoř.stip. DU			
Počáteční stav		0,00		
BAN/0971/00430/22	06.10.2022	38 000,00	0,00 2 mimořádná stiendia	

Výsledovka s očekávanými náklady
Pohyby za období 01 - 12 / 2022

Pracoviště:	*****	Všechny vybrané analytiky
Činnost:	****	Všechny vybrané analytiky
Fullcost:	*****	Všechny vybrané analytiky
Zakázka:	2102	SV Heteroaromatické molekuly ovl. lidské
Podzakázka:	***	Všechny podzakázky

Účet	Název účtu	Má dátí	Dal	Zůstatek
549 006	Jiné ostatní náklady mimoř.stip. DU			
Počáteční stav		0,00		
BAN/0971/00459/22	18.10.2022	35 976,00	0,00	1 mimořádná stipendia
549 006	Jiné ostatní náklady mimoř.stip. D	73 976,00	0,00	73 976,00
549	Jiné ostatní náklady	74 216,86	0,00	74 216,86
Náklady celkem		674 806,07	0,00	674 806,07
691 006	Provoz.dotace věda MŠMTspecifický výzkum			
Počáteční stav		0,00		
MAN/0910/00014/22	16.03.2022	0,00	674 380,00	dotace MŠMT SVV zak. 21**
691 006	Provoz.dotace věda MŠMTspecific	0,00	674 380,00	674 380,00
691	Přijaté přís. mezi zúčt.mezi org.slc	0,00	674 380,00	674 380,00
Výnosy celkem		0,00	674 380,00	674 380,00
Účetní hospodářský výsledek:			-426,07	
Hospodářský výsledek včetně očekávaných nákladů:			-426,07	

Účetní hospodářský výsledek za vybrané: -426,07

Hospodářský výsledek včetně očekávaných nákladů za vybrané: -426,07

Výběrová kritéria (omezení sestavy se řídí právy uživatele herrmma1 (uvedena v závorce))

Pracoviště: (04[45|90]*|0447*)

Činnost: (***|1210)

Fullcost:

Zakázka: 2102 (*|*)

Podzakázka:

Zahrnutý všechny předpokládané náklady