

Anotácia úlohy výskumu a vývoja
ukončenej k 30. 6. 2011

Názov úlohy: **Dobudovanie špičkového laboratória so zameraním na nukleárnu magnetickú rezonanciu (NMR)**

Číslo úlohy: **2003SP200280203**

Názov štátneho programu výskumu a vývoja: **Komplexné riešenie podpory a efektívneho využívania infraštruktúry výskumu a vývoja**

Dodávateľ riešenia úlohy: **Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie**

Zodpovedný riešiteľ: **doc. Ing. Tibor Liptaj, CSc.**, FChPT STU v Bratislave

Objednávateľ: Úlohu výskumu a vývoja rozvoja infraštruktúry financovalo **Ministerstvo školstva, vedy, výskumu a športu SR** v zmysle grantovej schémy štátneho programu výskumu a vývoja podľa zákona 172/2005 Z. z. o organizácii štátnej podpory výskumu a vývoja a o doplnení zákona č. 575/2001 Z. z. o organizácii činnosti vlády a organizácii ústrednej štátnej správy v znení neskorších predpisov v znení zákona č. 233/2008 Z. z. a v znení zákona č. 40/2011 Z. z.

Číselné kódy odborov vedy a techniky: 010401 - Analytická chémia, 010404 - Fyzikálna chémia, 030213 - Röntgenológia a rádiológia

Kľúčové slová: NMR infraštruktúra, NMR vzdelávanie, NMR tuhej fázy, NMR zobrazovanie

Predmetom riešenia úlohy tematického štátneho programu výskumu a vývoja (ŠPvAV) „*Dobudovanie špičkového laboratória so zameraním na nukleárnu magnetickú rezonanciu*“ bolo **vybudovanie Národného centra pre nukleárnu magnetickú rezonanciu (NMR)** s cieľom nápravy kritickej situácie, ktorá v tejto oblasti na Slovensku existovala.

Bolo vybudované Národné centrum NMR (NC NMR) s charakterom centra excelentnosti. Jednotlivé riešiteľské pracoviská sa stali centrami pre špecifické aplikácie NMR v rámci NC NMR. Vzniklo 6 centier, ktoré predmetovo i regionálne pokrývajú základné potreby NMR analýz pre všetkých potenciálnych užívateľov:

- a) Centrum NMR pre štúdium štruktúry, dynamiky a interakcií biomolekúl, Chemický ústav, SAV Bratislava,
- b) Centrum pre NMR spektroskopiu v tuhej fáze, FEI Technická univerzita, Košice,
- c) Centrum NMR pre metabolizmus a potraviny, FCHPT Slovenská technická univerzita, Bratislava,
- d) Centrum NMR pre supramolekulovú chémiu, PríF Univerzita Komenského, Bratislava,
- e) Centrum NMR pre štúdium štruktúry, dynamiky a interakcií organických molekúl, PríF UPJŠ, Košice,
- f) Centrum NMR pre zobrazovanie, Ústav merania, SAV Bratislava.

NMR centrá sú garantmi rozvoja špecifických aplikácií NMR na Slovensku. Ich úlohou je všestranná podpora týchto implementácií pre potreby výskumnej a výrobnjej praxe ako i zabezpečenie vzdelávania a propagácie nových NMR metód na všetkých stupňoch.

Centrá zamerané na NMR spektroskopické aplikácie sú vybavené výkonnými výskumnými spektrometrami so supravodivým magnetom s magnetickou indukciou 14.1 Tesla (9.4 Tesla, v prípade centra pre NMR v tuhej fáze). Pre „in-vivo“ NMR aplikácie je NC NMR vybavené moderným spektrometrom s horizontálnym magnetom s indukciou 4.7 Tesla. Okrem toho sú tieto pracoviská vybavené výkonnými prístrojmi na rutinné aplikácie a zabezpečenie vysokej priepustnosti meraných vzoriek. Veľkou výhodou je vysoká kompatibilita NMR prístrojového

vybavenia, čo do značnej miery zjednodušuje a zefektívňuje jeho prevádzku (zdieľanie „know-how“, ale i NMR sond a iných agregátov, jednoduchšia identifikácia porúch,..). Medzi najdôležitejšie doplnkové vybavenie patrí moderný hmotnostný spektrometer kombinovaný s dvojrozmernou plynovou chromatografiou (GC-GC-MS/TOF). Špecifické prístrojové vybavenie zamerané na NMR zobrazovanie bolo vybudované na pracovisku Ústavu merania SAV.

Vybudovaná prístrojová infraštruktúra sa intenzívne využíva, spravidla v nepretržitej prevádzke (NMR spektrometre). V súčasnosti sa na tejto infraštruktúre ročne vykoná okolo 25 tisíc NMR experimentov na takmer 15 tisíc vzorkách, v rámci riešenia cca 130 projektov základného i aplikovaného výskumu, pre riešiteľské kolektívy z celého Slovenska.

Počas riešenia úlohy boli riešiteľské pracoviská organizačne integrované do NC NMR s cieľom koordinácie postupu nielen pri riešení úlohy, ale aj následnej realizácie všetkých jej výstupov. Činnosť NC NMR je riadená a koordinovaná vedením NC NMR, ktoré je zložené zo zodpovedných riešiteľov z každého zo šiestich aplikačných centier NMR. Počas riešenia úlohy sa táto koordinácia činnosti sa ukázala byť veľmi výhodná najmä pri verejnom obstarávaní, čo umožnilo využiť pridelené finančné prostriedky veľmi efektívnym spôsobom (úspora vyše 40% nákladov (~ 3.2 mil. €) na kapitálové výdavky v 2. etape riešenia úlohy). Všetky pracoviská NC NMR na štandardnej úrovni zabezpečujú výskumnú činnosť v širokej oblasti aplikácií NMR. V špecifickej oblasti, však zabezpečujú expertnú činnosť pre celú odbornú komunitu na Slovensku. Tým sa zabezpečilo pokrytie NMR činnosti na vysokej úrovni pre širokú oblasť aplikácií NMR. Koordinovaná a spoločne organizovaná je taktiež vzdelávacia a propagačná činnosť. Ide hlavne o organizovanie odborných seminárov, škôl NMR a NMR konferencií. V roku 2007 bola zorganizovaná škola NMR a pripravuje sa pravidelný cyklus škôl NMR. V roku 2011 NC NMR zorganizovalo medzinárodnú konferenciu „Magnetic Moments in Central Europe“ v Tatranskej Lomnici.

Pracovníci riešiteľských kolektívov sú aktívne zapojení do výchovy študentov všetkých stupňov vysokoškolského vzdelávania a to jednak formou výučby NMR a jej aplikácií na svojich materských pracoviskách a jednak ako vedúci diplomových a doktorandských prác. Ročne sa na pracoviskách NC NMR priamo školia cca 10 doktorandi. Okrem toho NMR prístrojové vybavenie intenzívne využívajú ďalší doktorandi (~ 100), hlavne z odboru organická chémia, fyzikálna chémia, analytická chémia a biochémia. Pravidelne sa uskutočňujú školenia a odborné NMR semináre pre užívateľov i obsluhu spektrometrov (5-10 podujatí ročne), z ktorých viaceré v spolupráci so zahraničnými odborníkmi.

Pracovníci NC NMR sa zapojili do medzinárodnej spolupráce a to nielen rozvíjaním bilaterálnej spolupráce, ale aj aktívnou účasťou v EU projekte 7. RP „East NMR“ a organizáciou viacerých medzinárodných seminárov a konferencií (najdôležitejšie: PHELINET, Smolenice 25. -28. marec 2009; MMCE 2011, Tatranská Lomnica 16.-21. marec 2011).

Na propagáciu výsledkov riešenia úlohy ŠPVaV a nových aplikačných možností NMR slúži hlavne web stránka NC NMR (<http://www.nmr.sk>). Propagácia sa vykonáva taktiež formou informačných seminárov, pri propagácii štúdia na VŠ, v lokálnych (inštitucionálnych) médiách i verejných médiách (STV2: NMR objav storočia, 1.6.2011, http://www.sav.sk/index.php?lang=sk&charset=&doc=servicesnews&source_no=53&news_no=3905).

Od roku 2012 bude v spolupráci s MŠVVaŠ SR založená „Škola NMR“ s cieľom rozvoja vedeckého poznania a profesijnej výchovy výskumníkov v oblasti NMR.

Spoločenským ocenením výsledkov riešenia úlohy bolo ocenenie riešiteľského kolektívu Cenou SAV za budovanie infraštruktúry vedy a techniky (pozri:

http://www.sav.sk/index.php?lang=sk&charset=&doc=services-news&news_no=2911).