

1. Názov výskumnej infraštruktúry: **Laboratórium štruktúrnej analýzy (Laboratory of X-Ray Structural Analysis)**
2. Akronym: **LASTRA**
3. Webstránka: -
4. Základné údaje o výskumnej infraštruktúre:
  - Doba budovania: **2008 - 2011**
  - Typ: **sústredené na jednom mieste**
  - Kontaktná osoba: **prof. RNDr. Juraj Černák, CSc., [juraj.cernak@upjs.sk](mailto:juraj.cernak@upjs.sk)**
  - Priemerný počet užívateľov za rok – slovenskí vedeckí pracovníci - **20**
  - Priemerný počet užívateľov za rok – zahraniční vedeckí pracovníci z iných štátov EÚ - **1**
  - Priemerný počet užívateľov za rok – zahraniční vedeckí pracovníci mimo členských štátov EÚ - **3**
  - Zoznam projektov z Operačného programu Výskum a vývoj, ktoré prispeli k vytvoreniu, resp. modernizácii výskumnej infraštruktúry:
    1. **Centrum pokročilých fyzikálnych štúdií materiálov v extrémnych podmienkach (EXTREM) / 26220120005 / 47 500 EUR**
    2. **Dobudovanie Centra pokročilých fyzikálnych štúdií materiálov v extrémnych podmienkach (EXTREM II) / 26220120047 / 30 000 EUR**
5. Podrobnejšie údaje o oblasti činnosti:
  - **Opis a predmetu činnosti**

**Laboratórium štruktúrnej analýzy** Prírodovedeckej fakulty UPJŠ (LŠA) pod vedením prof. RNDr. Juraja Černáka, CSc. je vybavené počítačom riadeným špičkovým monokryštálovým difraktometrom XCalibur (Oxford Instruments) s polohovo citlivým detektorom (CCD area detector Sapphire 2) a grafitovým monochromátorom. Existujúci základný prístroj bol postupne dovybavený chladičom kryštálov Desktop Cooler, ktorý umožňuje realizovať merania pri ľubovoľnej teplote v teplotnom intervale 170 až 293 K a generátorom Spellman DF60N3 z prostriedkov projektov ŠF „Extrem - Centrum pokročilých fyzikálnych štúdií materiálov v extrémnych podmienkach“ (ITMS 26220120005) a „Extrem - Dobudovanie Centra pokročilých fyzikálnych štúdií materiálov v extrémnych podmienkach“ (ITMS 26220120047) v celkovej hodnote viac ako 77 tis. €.

**Monokryštálový difraktometer XCalibur** je zariadenie určené na zber difrakčných dát z monokryštálov. Na základe nameraných dát sa určujú základné kryštalografické údaje o skúmanej látke (mriežkové parametre, priestorová grupa súmernosti) a následným spracovaním údajov sa určí trojrozmerná kryštálová štruktúra skúmanej látky, to je akými chemickými väzbami a medzimolekulovými silami sú atómy pospájané do molekúl a následne do trojrozmernej priestorovej štruktúry. Na získanie kompletných dát postačuje veľkosť kryštálu v rozsahu od 0,1 do 0,5 mm.

Laboratórium štruktúrnej analýzy je lokalizované v priestoroch Katedry anorganickej chémie Ústavu chemických vied na Moyzesovej 11 na prvom poschodí. Bývalé nevyhovujúce priestory boli zrekonštruované a prestavané vrátane vybavenia klimatizáciou v celkovej hodnote takmer 10 tis. €, najmä za podpory projektov APVV a VEGA.

- **Kľúčové slová charakterizujúce výskumnú oblasť**

monokryštalová štruktúrna analýza, anorganická chémia, koordinačná chémia

- **Zdôvodnenie unikátnosti/strategickej dôležitosti pre Slovenskú republiku**

Metóda monokryštalovej štruktúrnej analýzy je prakticky jedinou priamou metódou stanovenie kryštalovej štruktúry študovaných látok.

- **Priradenie výskumnej infraštruktúry k jednej, alebo viacerým oblastiam špecializácie z pohľadu dostupných vedeckých a výskumných kapacít RIS3 SK:**

1. materiálový výskum a nanotechnológie (primárna oblasť)
2. biotechnológie a biomedicína (sekundárna oblasť)

- **Schopnosť realizovať aktivity, priradené k jednej, alebo viacerým rozvojovým tendenciám špecializácie z pohľadu dostupných VaV kapacít RIS3 SK:**

1. VaI v oblasti nových materiálov, ich komponentov, polymérnych kompozitov a ich využitia v praxi,
2. technológie so zameraním na špeciálne chemické a farmaceutické substancie.

6. Údaje o činnosti a o otvorenom a nediskriminačnom (open access) prístupe k jej službám

- **Zoznam a stručný popis výskumných služieb, ktoré môže poskytovať výskumná infraštruktúra:**

- názov výskumnej služby: **Štúdium kryštalovej štruktúry kryštalických látok v podobe monokryštálov**

- popis výskumnej služby:

Unikátne zariadenie je určené na zber difrakčných dát z monokryštálov. Na základe nameraných dát sa určujú základné kryštalografické údaje o skúmanej látke (mriežkové parametre, priestorová grupa súmernosti) a následným spracovaním údajov sa určí trojrozmerná kryštalová štruktúra skúmanej látky, to je akými chemickými väzbami a medzimolekulovými silami sú atómy pospájané do molekúl a následne do trojrozsomernej priestorovej štruktúry. Na získanie kompletných dát postačuje veľkosť kryštálu v rozsahu od 0,1 do 0,5 mm.

- **Zoznam unikátnych zariadení/funkčných celkov s kúpnu jednotkovou cenou nad 150 tisíc EUR bez DPH, ktoré sú súčasťou výskumnej infraštruktúry:**

Výskumná infraštruktúra Laboratória štruktúrnej analýzy:

- **Monokryštalový difraktometer XCalibur** je zariadenie určené na zber difrakčných dát z monokryštálov. Ide o špičkový počítačom riadený prístroj s polohovo citlivým detektorom (CCD area detector Sapphire 2) a grafitovým monochromátorom. Existujúci základný prístroj bol postupne dovybavený chladičom kryštálov Desktop Cooler, ktorý umožňuje realizovať merania pri

ľubovoľnej teplote v teplotnom intervale 170 až 293 K a generátorom Spellman DF60N3. Na získanie kompletných dát postačuje veľkosť kryštálu v rozsahu od 0,1 do 0,5 mm.