

1. Názov výskumnej infraštruktúry: **Centrum NMR pre štúdium štruktúry, dynamiky a interakcií organických molekúl**
2. Akronym: **NC NMR**
3. Webstránka: <http://www.nmr.sk>
4. Základné údaje o výskumnej infraštruktúre:
 - Doba budovania: **2004 - 2012**
 - Typ: **distribúované**
 - Kontaktná osoba: **doc. RNDr. Ján Imrich, CSc., jan.imrich@upjs.sk**
 - Priemerný počet užívateľov za rok – slovenskí vedeckí pracovníci - **40**
 - Priemerný počet užívateľov za rok – zahraniční vedeckí pracovníci z iných štátov EÚ - **4**
 - Priemerný počet užívateľov za rok – zahraniční vedeckí pracovníci mimo členských štátov EÚ - **5**
 - Zoznam projektov z Operačného programu Výskum a vývoj, ktoré prispeli k vytvoreniu, resp. modernizácii výskumnej infraštruktúry: -

5. Podrobnejšie údaje o oblasti činnosti:

- **Opis a predmetu činnosti**

NC NMR vzniklo ako výsledok riešenia úlohy č. 2003SP200280203 „Dobudovanie špičkového laboratória so zameraním na nukleárnu magnetickú rezonanciu (NMR)“ štátneho programu výskumu a vývoja „Komplexné riešenie podpory a efektívneho využívania infraštruktúry vedy a výskumu“. Do pilotnej prevádzky bolo odovzdané 14.11.2012.

Súčasťou Národného centra NMR je aj 5 ďalších pracovísk Národného centra NMR SR: Centrum NMR pre metabolizmus a potraviny, FCHPT, Slovenská technická univerzita v Bratislave (STU). K centru patrí pracovisko „in-vivo NMR“ (pracovisko UNB Kramáre).

Centrum NMR pre supramolekulovú chémiu, PriF, Univerzita Komenského v Bratislave (UK).

Centrum NMR pre štúdium štruktúry, dynamiky a interakcií biomolekúl, Chemický ústav SAV, Bratislava (CHÚ SAV).

Centrum pre NMR spektroskopiu v tuhej fáze, FEI, Technická univerzita v Košiciach (TUKE).

Centrum NMR zobrazovania, Ústav merania SAV, Bratislava (ÚM SAV).

Vedúci NC NMR je doc. Ing. Tibor Liptaj, CSc., FCHPT STU Bratislava

Poslaním NC NMR je komplexné zabezpečovanie potrieb meraní v oblasti nukleárnej magnetickej rezonancie a NMR spektier pre širokú komunitu chemikov, fyzikov, biológov a materiálových vedcov, doktorandov, študentov magisterského a inžinierskeho štúdia, vysoké školy, ústavy SAV a ústavy aplikovaného výskumu a výrobné a výskumné organizácie najmä v chemickom priemysle. Ročne sa jedná

o niekoľko stoviek fyzických osôb a niekoľko desiatok právnických osôb ako užívateľov NMR a zadávateľov NMR meraní.

- **Kľúčové slová charakterizujúce výskumnú oblasť**

NMR kvapalín a roztokov, organická, anorganická, fyzikálna a analytická chémia, biochémia, lekárske vedy, chemický priemysel, základný výskum, aplikovaný výskum

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

Národné centrum NMR je unikátna vedecká infraštruktúra založená ako koordinované centrum 6 kľúčových organizácií vedy a výskumu v SR, ktoré komplexne pokrýva NMR služby v SR, ktoré sa zriadilo s rozhodujúcou podporou Ministerstva školstva, VVaŠ v období rokov 2002-2012. V NC NMR pracujú všetci významní NMR odborníci v rámci SR. Podporuje ročne stovky mladých i skúsených výskumníkov a študentov v oblastiach prírodných, technických i lekárskeho vied s mnohými desiatkami výstupov v karentovaných časopisoch ročne. NMR centrum je nepostrádateľné pre potreby vedeckej komunity SR.

- **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)
3. pôdohospodárstvo a životné prostredie, vrátane moderných chemických technológií šetrných k životnému prostrediu (sekundárna oblasť)
4. udržateľná energetika a energie (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. v oblasti plastov výskum orientovaný napr. na využívanie recyklovateľnosti a biodegradovateľných plastov v špecifických aplikáciách so zníženou záťažou na životné prostredie po ukončení doby životnosti;
3. v oblasti VaI technológií pre prieskum a ťažbu surovín;
4. vývoj inovatívnych riešení umožňujúcich racionálne hospodárenie v pôdohospodárstve a lesnom hospodárstve znižujúcich zaťažovanie životného prostredia, ako sú moderné hnojivové systémy a chemické substancie používané v týchto odvetviach;
5. 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: **Analýza štruktúry, vlastností, reaktivity a reakcií organických, anorganických a bioorganických zlúčenín a zmesí**
- popis výskumnej služby:

Laboratórium NMR poskytuje širokú paletu NMR meraní v kvapalnej i tuhej fáze, jednorozmerných i viacrozmerných NMR spektier, 2D NMR spektier, včítane in-vivo meraní a MRI zobrazovania pre vedecké účely. Služby sú poskytované v rámci vedeckej spolupráce resp. formou meraní za úplatu. Naše pracovisko sa špecializuje na NMR malých molekúl v roztoku, ^1H , ^{13}C a ^{15}N NMR spektrá, ale dostupné sú merania i ďalších jadier.

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

Výskumná infraštruktúra Centra NMR pre štúdium štruktúry, dynamiky a interakcií organických molekúl:

- **Unikátny NMR spektrometer** Varian VNMRS 600 MHz, obstarávacia cena 800 tis. €, rok uvedenia do prevádzky: 2010
- **Rutinný NMR spektrometer** Varian Mercury Plus 400 MHz, obstarávacia cena 450 tis. €, rok uvedenia do prevádzky: 2004.