

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)

ITMS: 26240120025

Druh projektu: dopytovo orientovaný v rámci Centier excelentnosti

Zodpovedný riešiteľ: doc. RNDr. Martin Putala, PhD., KOCH PRIF UK

**Hlavný partner : Univerzita Komenského v Bratislave
Prírodovedecká fakulta**



Partneri:



**Slovenská technická univerzita v Bratislave
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie**



**Chemický ústav
Slovenskej akadémie vied**

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



Európska únia
Európsky fond regionálneho rozvoja



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Hlavný cieľ:

Podpora a ďalšie skvalitnenie podmienok pre realizáciu špičkového základného výskumu v rámci oblasti zelenej chémie a zvýšenie jeho prínosu pre spoločnosť a prax

Špecifické ciele

- 1) Zabezpečenie kontinuálneho efektívneho fungovania a manažmentu centra excelentnosti s dôrazom na medzinárodnú spoluprácu a spoločensko-hospodársky dopad
- 2) Dovybavenie IKT infraštruktúry nevyhnutnej pre kvalitné fungovanie centra a podporu riešenia projektov výskumu a vývoja
- 3) Rozšírenie technickej infraštruktúry pracovísk centra za účelom podpory realizácie prebiehajúcich a pripravovaných výskumných a vývojových projektov

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



Európska únia
Európsky fond regionálneho rozvoja



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Anotácia projektu

Projekt je v náväznosti na projekt I. etapy zameraný na doplnenie a modernizáciu technickej infraštruktúry, potrebnej pri rozvíjaní metód zelenej chémie, na špičkovú medzinárodnú úroveň. Ide o metódy, ktoré sú šetrné voči životnému prostrediu (dizajnom vlastností, minimalizáciou tvorby odpadov, znížením spotreby energie pri výrobe), resp. pomáhajú už existujúce znečistenie zvládať (pochopením procesov a rýchlym a vysokoúčinným monitorovaním polutantov v životnom prostredí).

V Centre je pozornosť venovaná tiež zapojeniu do medzinárodnej spolupráce a do riešenia úloh pre potreby praxe, ľudskému faktoru (kontinuite, doplneniu a zvýšeniu kvalifikovanosti odborných pracovníkov), doplneniu IKT (vrátane podmienok pre teoretické predpovede v oblasti vedeckého zamerania projektu) a zabezpečeniu prístupu k najkomplexnejšej chemickej databáze literárnych poznatkov

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Spôsob riešenia projektu

- skvalitňovanie ľudského potenciálu (workshopy, odborné semináre, prednášky, konferencia),
- premietnutie problematiky zelenej chémie do vzdelávania,
- dobudovanie infraštruktúry pre kvalitné fungovanie centra a podporu riešenia projektov,
- rozvíjanie metodík pre metódy a procesy zelenej chémie – vývoj metód šetrných k životnému prostrediu a metód pre pochopenie procesov a monitorovanie životného prostredia:
 - výpočtové metódy,
 - stereoselektívna katalýza,
 - netradičné rozpúšťadlá a zdroje energie,
 - chemické analýzy metabolómu,
 - separačné metódy na (ultra)stopovej úrovni a pre mnohozložkové zmesi

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 1.1: Efektívny manažment centra a prehĺbenie jeho spoločensko-hospodárskeho a medzinárodného významu

Zodpovedná osoba: **doc. RNDr. Martin Putala, PhD., KOCH PRIF UK**

Cieľ: Efektívnym manažmentom dosiahnuť vysokú mieru integrácie v ňom združených excelentných výskumno-vzdelávacích kolektívov a stimulovať ich integráciu do medzinárodnej spolupráce vo výskume a do riešenia významných projektov VaV.

Realizované činnosti:

- **vyhodnocovanie a aktualizácia:**
 - možnosti integrácie vedeckých projektov centra,
 - prípravy a riešenia medzinárodných projektov,
 - zapojenia do riešenia významných výskumných projektov a pre potreby praxe.
- **organizácia:**
 - workshopov centra s prezentáciou obstaranej unikátnej infraštruktúry,
 - odborných seminárov a prednášok s problematikou zelenej chémie,
 - konferencie „Advances in Organic Chemistry“ (09/2012).

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 1.2: Aplikácia výsledkov výskumu do vzdelávacej činnosti a ich diseminácia k odbornej verejnosti

Zodpovedná osoba: **doc. Ing. Mária Mečiarová, PhD., KOCH PRIF UK**

Cieľ : Premietnutie excelentného výskumu a jeho integrácie v centre do vzdelávania v magisterskom a doktorandskom stupni štúdia, do aktivít smerujúcich k sprostredkovaniu výsledkov výskumov centra učiteľom a študentom stredných škôl a do externého celoživotného vzdelávania

Metodológia aktivity:

- implementácia nových trendov zelenej chémie do prednášok „Zelená chémia“ v magisterskom stupni štúdia a do curricula doktorandských programov
- zaradenie diplomantov a doktorandov do riešenia výskumných úloh v oblasti zelenej chémie
- organizovanie kurzov zelenej chémie v rámci celoživotného vzdelávania a prednášok pre učiteľov a študentov stredných škôl

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 2.1: Dobudovanie IKT siete a dátového centra

Zodpovedná osoba: **Ing. Ľubica Dobročková, CVS, PRIF UK**

Cieľ : Zvýšenie kapacity dátového centra a skvalitnenie sieťovej komunikácie v rámci kooperácie pracovísk jej stálym monitorovaním a definovaním nových požiadaviek na tvorbu VPN sietí pre pracoviská.

Metodológia aktivity:

- technologické rozšírenie základu dátového centra
- manažment a servis sieťovej komunikácie

Pre problémy s VO sa zatiaľ nepodarilo obstarat' plánované doplnenie dátového centra

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 2.2: Zabezpečenie elektronických databáz s prístupom k najnovším poznatkom

Zodpovedná osoba: **doc. RNDr. Andrej Boháč, PhD., KOCH PRIF UK**

Cieľ : Prístupom k elektronickým databázam vytvoriť predpoklad pre skvalitnenie riešenia výskumných projektov.

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Informatizácia je dôležitým nástrojom pre uskutočňovanie cieleného výskumu. Umožňuje efektívnejšiu a bezpečnejšiu syntézu požadovaných zlúčenín napr. liečiv a biologicky aktívnych látok, alebo pokročilých materiálov. Práce v rámci tejto aktivity umožnili pripojenie, zaškolenie a počas trvania projektu aj praktické využívanie svetovo najväčšej chemicko – biologickej informačnej platformy SciFinder Scholar.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)

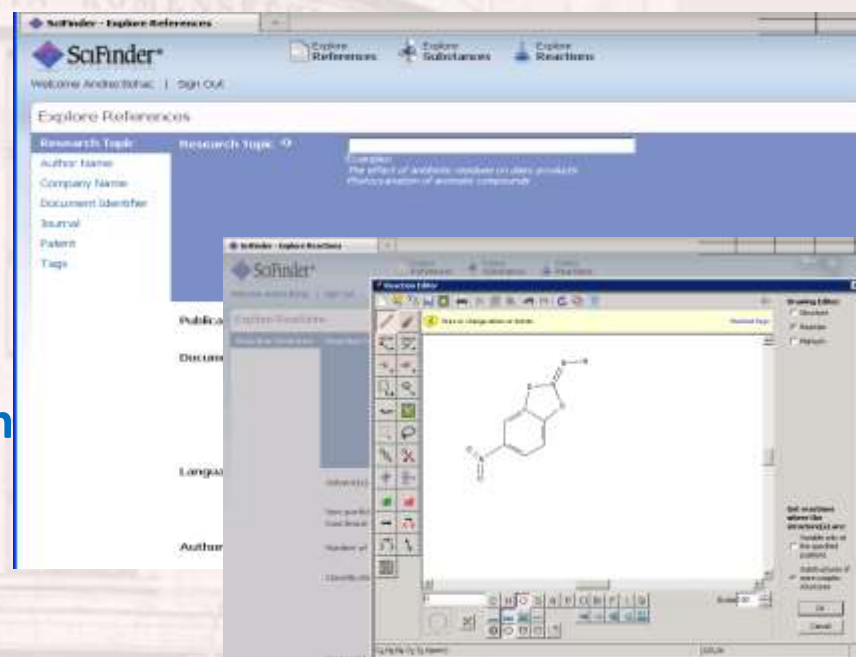


Aktivita 2.2.: Zabezpečenie elektronických databáz s prístupom k najnovším poznatkom

Unikátna databáza SciFinder Scholar:

Umožňuje rýchly textový, ako aj subštruktúrny prístup k vedeckým informáciám ohľadom:

- ca 70 miliónov chemických zlúčenín
- ca 30 000 000 vedeckých článkov a patentov z viac ako 10 000 odborných časopisov
- > 16 000 000 chemických reakcií
- rýchlosť rastu databázy je 3 000 abstraktov denne, 12 000 nových zlúčenín denne, 40 000 reakcií týždenne



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI
METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 2.3: Rozšírenie a dobudovanie siete výkonnej výpočtovej techniky pre modelovanie priebehov reakcií a vlastností látok

Zodpovedná osoba: Ing. Igor Tvaroška, DrSc., Centrum Glykomiky, CHÚ SAV

Cieľ : Dobudovanie počítačovej a softvérovej infraštruktúry pre riešenie problémov týkajúcich sa predikcie štrukturálnych a energetických parametrov organických a biochemických reakcii, ako aj biologicky aktívnych látok a nových materiálov

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Hybridné kvantovo-mechanické a molekulo-mechanické (QM/MM) a QM teoretické metódy umožňujú presné predikcie štruktúr tranzitných stavov a intermediátov, a väzbových afinít inhibítorov enzýmov. Výskum v rámci aktivity smeruje k vývinu nových liečiv a pochopeniu katalytického mechanizmu organických a enzýmových reakcií.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 2.3: Rozšírenie a dobudovanie siete výkonnej výpočtovej techniky pre modelovanie priebehov reakcií a vlastností látok

Superpočítačový server (Linux Beowulf type clusters) v nepretržitej 24hod prevádzke. Intel Xeon Quad-Core (336 CPU jadier), 816 GB RAM, 1Gb Ethernet

Umožňuje výpočty a modelovanie

- organických reakcií
- enzýmových reakcií
- filtrovanie veľkých knižníc látok
- *de novo* dizajn biologicky aktívnych látok

Využitie :

- pre štruktúrny dizajn liečiv a katalyzátorov organických reakcií
- pri biochemickej a štruktúrálnej charakterizácii enzýmov ako aj reaktívnych intermediátov chemických reakcií



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

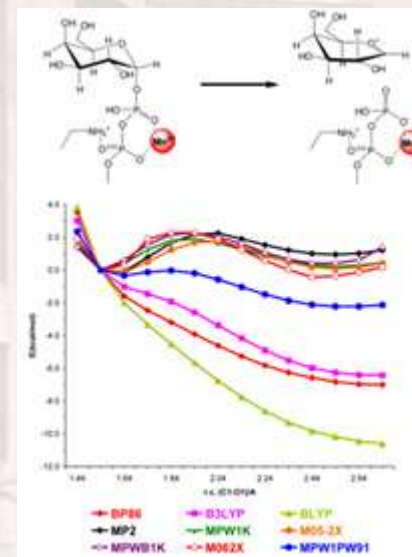
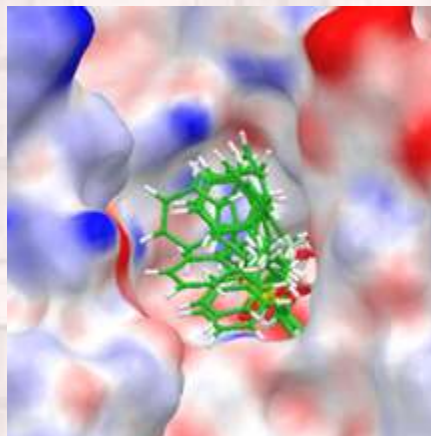
DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 2.3: Rozšírenie a dobudovanie siete výkonnej výpočtovej techniky pre modelovanie priebehov reakcií a vlastností látok

Ďalšie softvérové vybavenie pre skvalitnenie výskumu v tejto oblasti

- programový balík Schrodinger pre štruktúrny dizajn liečiv a modelovanie enzýmových reakcií
- program Gaussian pre modelovanie organických reakcií a fyzikálno-chemických vlastností látok
- program ADF pre modelovanie enzýmových reakcií



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 2.4: Dobudovanie pracoviska pre počítačové modelovanie chémie polutantov

Zodpovedná osoba: **prof. RNDr. Vladimír Kellö, DrSc., KTFCH PRIF UK**

Cieľ : Dobudovať riešiteľské pracovisko vybavením IKT, servermi, softvérovým vybavením tak, aby bolo schopné počítačovým modelovaním získať informácie a poznatky, potrebné pre pochopenie zákonitosti chémie polutantov v životnom prostredí a využiť ich pri projektovaní účinkov nových látok v životnom prostredí.

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Rozšíriť možnosti doteraz rozvíjaných metód (najmä metódy Coupled Cluster) aj na väčšie molekuly a najmä ich väčšie klastre, zaujímavé z hľadiska chémie životného prostredia.

Pre problémy s VO sa zatiaľ nepodarilo vybudovať plánované komplexné laboratórium počítačovej chémie

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.1: Rozšírenie vybavenia pracoviska pre stereoselektívnu katalýzu komplexami kovov a organokatalyzátorov

Zodpovedná osoba: **doc. Mgr. Radovan Šebesta, PhD., KOCH PRIF UK**

Cieľ : rozšírenie a skvalitnenie vybavenia pracoviska pre stereoselektívnu katalýzu komplexami kovov a organokatalyzátorov za účelom zvýšenia výskumného potenciálu

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Stereoselektívna katalýza je dôležitým nástrojom zelenej chémie. Umožňuje efektívnejšiu syntézu chirálnych zlúčenín ako liečivá a ďalšie biologicky aktívne látky alebo pokročilé materiály. Výskum v rámci aktivity smeruje k vývinu nových katalyzátorov a katalytických reakcií.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.1: Rozšírenie vybavenia pracoviska pre stereoselektívnu katalýzu komplexami kovov a organokatalyzátorov

Unikátne zariadenie: CD spektrometer s doplnkami

Umožňuje meranie CD spektier

- v pevnej fáze
- v roztoku
 - v statickom režime,
 - pri HPLC analýze,
 - pri kinetických meraniach.

Využitie na charakterizáciu chirálnych zlúčenín ako napríklad:

- liečivá a ich medziprodukty
- biomakromolekuly ako proteíny a DNA
- molekulové prepínače
- katalyzátory stereoselektívnych reakcií



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.1: Rozšírenie vybavenia pracoviska pre stereoselektívnu katalýzu komplexami kovov a organokatalyzátorov

Ďalšie nadštandardné vybavenie pre skvalitnenie výskumu v tejto oblasti

- plynový chromatograf
- set pre kombinatoriálnu syntézu
- sada tlakových nádob
- automatizované flash chromatografy
- absorpčný spektrometer so stop-flow



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI
METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.2: Dobudovanie pracoviska biokatalýzy, vrátane aplikácie netradičných zdrojov energie a rozpúšťadiel

Zodpovedná osoba: Ing. Mária Mastihubová, PhD., CHÚ SAV

Cieľ : skvalitnenie a rozšírenie infraštruktúry pre riešenie projektov, ktorých cieľom je aplikácia metód biokatalýzy, netradičných rozpúšťadiel a zdrojov energie na ekologickejšie a efektívnejšie chemoenzymatické syntézy látok vysokou pridanou hodnotou na báze sacharidov a ich mimetík.

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Biokatalýza je dôležitým nástrojom zelenej chémie. Umožňuje efektívnejšiu syntézu bioaktívnych derivátov sacharidov ako liečiv alebo pokročilých materiálov. Výskum v rámci aktivity smeruje k vývinu nových biokatalyzátorov a biokatalytických reakcií.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.2: Dobudovanie pracoviska biokatalýzy, vrátane aplikácie netradičných zdrojov energie a rozpúšťadiel

Nadštandardné zariadenia:

- **Extraktor pre superkritický CO₂**
Využitie na ekologické nahradenie organických rozpúšťadiel
- **Plynový chromatograf s hmotnostným detektorom**
Využitie na skvalitnenie kvantitatívnej a kvalitatívnej analýzy vzoriek
- **Analytický kvapalinový chromatograf**
Využitie na štúdium kinetík biokatalytických reakcií



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI
METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.2: Dobudovanie pracoviska biokatalýzy, vrátane aplikácie netradičných zdrojov energie a rozpúšťadiel

Ďalšie vybavenie pre skvalitnenie výskumu v tejto oblasti

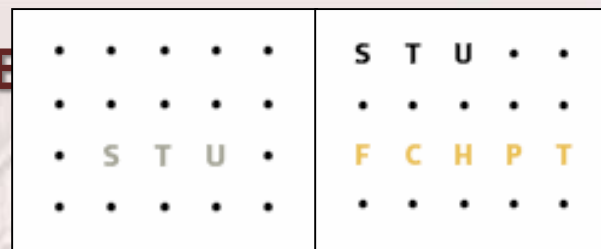
- Polarimeter
- Automatizovaný flash chromatograf
- Termozariadenia (termomixér, trepačka s inkubátorom)
- Kryostat
- Analytické mikrováhy



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI
METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.3: Skvalitnenie infraštruktúry pracoviska pre stereoselektívnu syntézu prírodných látok a ich analógov

Zodpovedná osoba: **prof. Ing. Tibor Gracza, DrSc., OUCH, ÚOCHKP, FCHPT STU**

Cieľ : Dobudovať infraštruktúru pre riešenie projektov, ktorých cieľom je príprava a štúdium nových chirálnych katalyzátorov (komplexov prechodných kovov s chirálnymi ligandami a organokatalyzátorov) a ich testovanie v reakciách za vzniku C-C väzieb.

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

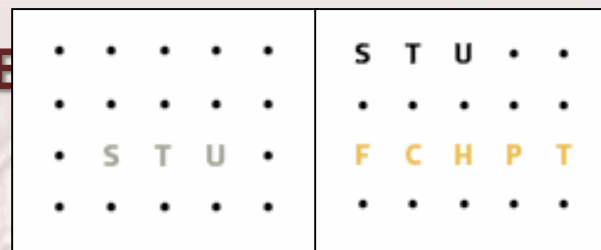
Asymetrická syntéza s využitím kryštalizáciou indukovanej transformácie, zlúčenín prechodných kovov a chirálnych organických zlúčenín ako katalyzátorov je moderným syntetickým nástrojom pre rozvoj zelenej chémie. Umožňuje efektívny prístup ku zlúčeninám s vysokou pridanou hodnotou (biologicky aktívne zlúčeniny, prírodné látky) chemickými, k životnému prostrediu šetrnými procesmi.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



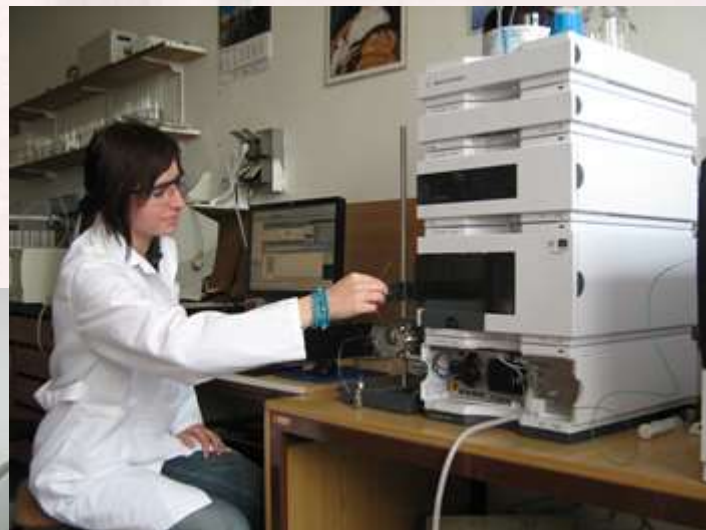
Aktivita 3.3: Skvalitnenie infraštruktúry pracoviska pre stereoselektívnu syntézu prírodných látok a ich analógov

Unikátne zariadenie: Ultrarýchly kvapalinový chromatograf (UFLC) s DAD a kombinovaným hmotnostným detektorom (ESI-APCI)

Využitie: rýchla identifikácia prekursorov prírodných látok a biologicky aktívnych zlúčenín z reakčných zmesí

Unikátne zariadenie: Drybox

Využitie: príprava, manipulácia a reakcie substancií (chirálné organokovové zlúčeniny a katalyzátory pre asymetrické reakcie) vyžadujúcich prostredie bez prítomnosti vlhkosti a kyslíka

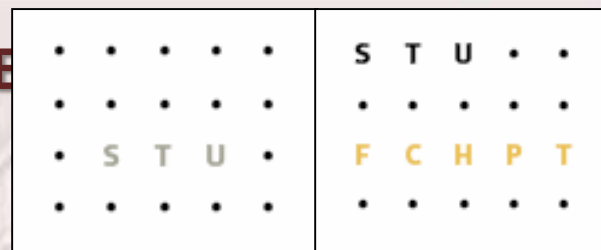


Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.3: Skvalitnenie infraštruktúry pracoviska pre stereoselektívnu syntézu prírodných látok a ich analógov

Ďalšie vybavenie pre skvalitnenie výskumu v tejto oblasti

- **Ponorný kryostat**
využitie pre reakcie vyžadujúce nízku teplotu
- **Veľkokapacitné destilačné zariadenie**
umožňuje recykláciu bežne používaných rozpúšťadiel a minimalizáciu kvapalných odpadov



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.4: Dovybavenie centrálneho pracoviska pre aplikáciu neklasických zdrojov energie a rozpúšťadiel

Zodpovedná osoba: **prof. RNDr. Štefan Toma, DrSc., KOCH PRIF UK**

Cieľ : Aplikácie nových vysoko účinných zdrojov energie, ako je mikrovlnné žiarenie, ultrazvukové vlnenie, mechanická energia, náhrada klasických organických rozpúšťadiel iónovými kvapalinami s cieľom minimalizovať negatívne ekologické dôsledky synteticky významných reakcií.

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Navrhovanie nových syntetických postupov, resp. optimalizácia existujúcich metód syntézy s cieľom zvýšiť reakčnú rýchlosť, výťažky aj selektivitu, pričom sa zároveň eliminujú negatívne vplyvy na životné prostredie. Nástrojom sú účinné zdroje energie, nové typy rozpúšťadiel a kvalitné analytické metódy.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.4: Dovybavenie centrálneho pracoviska pre aplikáciu neklasických zdrojov energie a rozpúšťadiel

Nadštandardné vybavenie pre skvalitnenie výskumu v tejto oblasti

- mikrovlnný reaktor
- guľový vybračný mlyn
- Ramanov spektrometer
- elementový analyzátor



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.5: Vybudovanie experimentálneho pracoviska pre metabonomické analýzy

Zodpovedná osoba: **doc. RNDr. Ivan Ostrovský, CSc., CHÚ PRIF UK**

Cieľ : **Zásadná inovácia experimentálnej základne pracoviska v rámci budovania špičkovej prístrojovej kapacity pre chemické analýzy metabolómu.**

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Získanie a uvedenie do prevádzky komplexu špičkových prístrojov z oblasti kombinovaných analytických metód na analýzu biomarkerov pre účely metabonomiky, využívajúcej vysokoúčinné analytické metódy pre detekciu produktov metabolizmu, vrátane potenciálnej prítomnosti metabolitov polutantov. Metóda poskytuje veľmi cennú informáciu pre diagnostiku zdravotného stavu s aplikáciou v klinickej praxi.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.5: Vybudovanie experimentálneho pracoviska pre metabonomické analýzy

Unikátne zariadenie: Plynový chromatograf s viacrozmerným
kvadrupólovým detektorom

Umožňuje meranie biomarkerov
v komplexných biologických matriciach.

Využitie na chemickú analýzu biomarkerov
pre metabonomiku.



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.6: Rozšírenie infraštruktúry pracoviska pre pokročilé elektroseparácie v kapilárach a na čipoch

Zodpovedná osoba: **doc. RNDr. Jozef Marák, CSc, KACH PRIF UK**

Cieľ : Dobudovať infraštruktúru pre riešenie projektov, ktorých cieľom sú separácie, analýza a identifikácia látok na (ultra)stopovej úrovni a pre mnohozložkové zmesi látok na báze súboru analytických a reakčných techník pre elektroseparácie v kapilárach a na (bio)chemických čipoch, vrátane pokročilej hmotnostnej spektrometrie

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Elektroseparácie v kapilárach a na čipoch sú v súčasnosti veľmi efektívnym nástrojom na ultrastopovú analýzu komplexných environmentálnych vzoriek (pitné a odpadové vody, pôdy, ovzdušie). Zároveň významne znižujú produkciu odpadu (toxické a karcinogénne látky) vznikajúceho pri chemickej analýze (dávkovanie extrémne malých objemov vzoriek a používanie malých objemov rozpúšťadiel a pomocných roztokov).

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.6: Rozšírenie infraštruktúry pracoviska pre pokročilé elektroseparácie v kapilárach a na čipoch

Unikátne zariadenie: preparatívny elektroforetický analyzátor

Preparatívny elektroforetický analyzátor s vodivostnou a DAD detekciou pre analýzu komplexných environmentálnych a biologických vzoriek:

- Analýza karcinogénnych látok v pitných vodách
- Analýza prídavných a pomocných látok v potravinách (sledovanie bezpečnosti potravín)
- Analýza liečiv v telových tekutinách
- Analýza opticky aktívnych látok (enantioméry aminokyselín, liečiv, atď.)
- Sledovanie zložitých reakčných schém a analýza medziproduktov



Európska únia
Európsky fond regionálneho rozvoja



Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.7: Skvalitnenie vybavenia pracoviska pre rýchlu ultrastopovú analýzu pokročilými technikami HPLC

Zodpovedná osoba: **doc. RNDr. Milan Hutta, CSc., KACH PRIF UK**

Cieľ : dobudovať infraštruktúru pre riešenie projektov, ktorých cieľom je HPLC analýza a charakterizácia látok na stopovej a ultrastopovej úrovni v zložitých maticiach kombinovanými separačnými mechanizmami a pokročilými detekčnými technikami, s dôrazom na vysokocitlivé optické metódy.

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Vysokoúčinná kvapalinová chromatografia je v súčasnosti najpoužívanejšia separačná metóda, ktorá v rámci aktivity našla uplatnenie najmä pri stanovení analytov v prostredí veľmi zložitých matric ako sú pôda, biologické vzorky, reakčné zmesi z technológie výroby liečiv a pod. Použitie multidetektorového zapojenia umožňuje získať väčšie množstvo informácií o charaktere vzoriek, napr. ELLSD umožňuje stanovenie distribúcie rozmeru častíc prítomných vo vzorkách.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.7: Skvalitnenie vybavenia pracoviska pre rýchlu ultrastopovú analýzu pokročilými technikami HPLC

Unikátne zariadenie: ELLSD a HPLC-SW-DAD

Elastic Laser Light Scattering Detector“ ELLSD

zariadenie na meranie hydrodynamického priemeru molekúl polymérov (humínové látky, proteíny, polysacharidy), ich asociátov a častíc v roztoku na báze rozptylu laserového svetla a tiež ako detektor s prietokovou mikrokyvetou pre mnohodetektorovú HPLC



Systém HPLC-SW-DAD

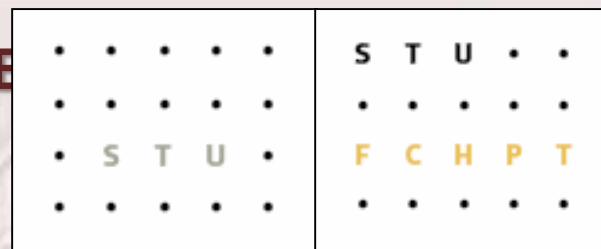
analytický chromatograf s automatickým dávkovačom, viackolónovým prepínačom a termostatovaným priestorom, DAD detektor, riadiaca jednotka, softvér.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Aktivita 3.8: Skvalitnenie vybavenia pracoviska metód komprehensívnej plynovej chromatografie

Zodpovedná osoba: **prof. Ján Krupčík, DrSc., OACH, FCHPT, STU**

Cieľ : Doplnenie infraštruktúry pracoviska plynovej chromatografie na kvalitatívnu úroveň nevyhnutnú pre medzinárodné výskumné aktivity v oblasti analýzy nových látok a ich impaktu na životné prostredie.

Rozvíjané metódy a procesy zelenej chémie:

Metodológie účinnej a rýchlej separácie zložitých typov vzoriek metódami viacrozmernej plynovej chromatografie a spojených techník plynovej chromatografie a hmotnostnej spektrometrie a ich aplikácie pre potreby hodnotenia kvality životného prostredia, napr. analýzy vybraných skupín polutantov v potravinách.

Unikátne zariadenie:

Komprehensívny plynový chromatograf (GCxGC) s detektorom elektrónového záchytu (mikroECD) a hmotnostne spektrometrickým detektorom (MSD).

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Dosiahnuté výsledky

- Obstarané prístroje boli zavedené do prevádzky a testované ich možnosti využitia pre riešenie úloh výskumu a vývoja v Centre. Dobudovaná infraštruktúra umožnila významne vylepšiť zastarávajúci stav prístrojového vybavenia, čo sa začalo prejavovať kvalitnejším, komplexnejším a modernejším riešením výskumných problémov. To podporilo zachovanie kvalitnej publikačnej činnosti v chémii na PRIF UK ako aj v organizáciách partnerov (FCHPT STU a CHÚ SAV). Dosiahnuté kvalitné vedecké výsledky boli tiež prezentované na domácich i medzinárodných konferenciách.
- Zorganizovaných bolo 9 workshopov centra s prezentáciou možností obstaranej unikátnej infraštruktúry.
- Zorganizované boli odborné semináre a prednášky, zahrňujúce problematiku zelenej chémie, vedeckých osobností centra (16) a špičkových zahraničných odborníkov (16).
- V termíne 09. – 13.09.2012 sa konala konferencia *XXXth Conference of Organic Chemists – Advances in Organic Chemistry* (Pokroky v organickej chémii) s účasťou renomovaných zahraničných prednášateľov.

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE

DOBUDOVANIE CENTRA EXCELENTNOSTI METÓD A PROCESOV ZELENEJ CHÉMIE (CEGreenII)



Ukončenie projektu

- V organizácii partnera CHÚ SAV sa podarilo skvalitniť vybudovanú IKT sieť pre modelovanie priebehov reakcií a vlastností látok.
- V organizácii hlavného partnera PriF UK sa podarilo vybudovať výpočtové laboratórium pre počítačové modelovanie chémie polutantov.
- Realizáciou projektu sa skvalitnili podmienky excelentných pracovísk centra pre realizáciu špičkového základného výskumu v oblasti zelenej chémie. Vyššia úroveň technickej a personálnej vybavenosti umožnila vyššiu pridanú hodnotu riešených výskumných projektov a zapojenie do medzinárodnej spolupráce.
- V rámci celoživotného vzdelávania sa uskutočnilo 6 prednášok na témy súvisiace so zelenou chémiou spolu pre 125 študentov a učiteľov stredných škôl.
- Do realizácie aktivít projektu sa zapojilo 126 výskumníkov iných organizácií, 76 študentov a 75 študentiek doktorandského štúdia, 24 výskumníkov a 25 výskumníčok do 35 rokov, 104 výskumníkov a 54 výskumníčok nad 35 rokov
- **Realizácia aktivít projektu bola ukončená 30.06.2014**
- **Prístroje a zariadenia sa naďalej využívajú.**

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku/
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ

