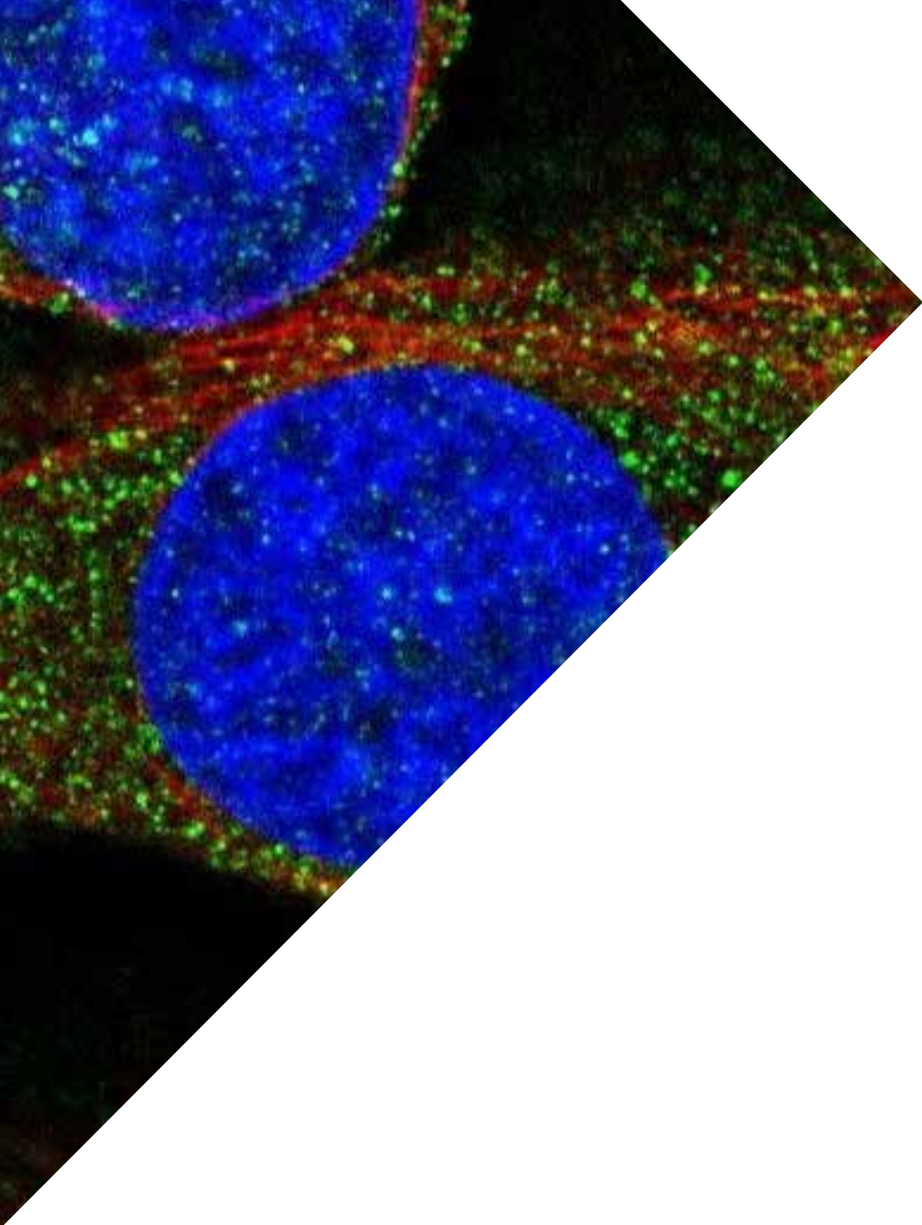




ISBN 978-80-972311-2-5



9 788097 231125

2017 VÝSKUMNÉ PROJEKTY S VYNIKAJÚCOU ÚROVŇOU

SK



AGENTÚRA
NA PODPORU
VÝSKUMU A VÝVOJA

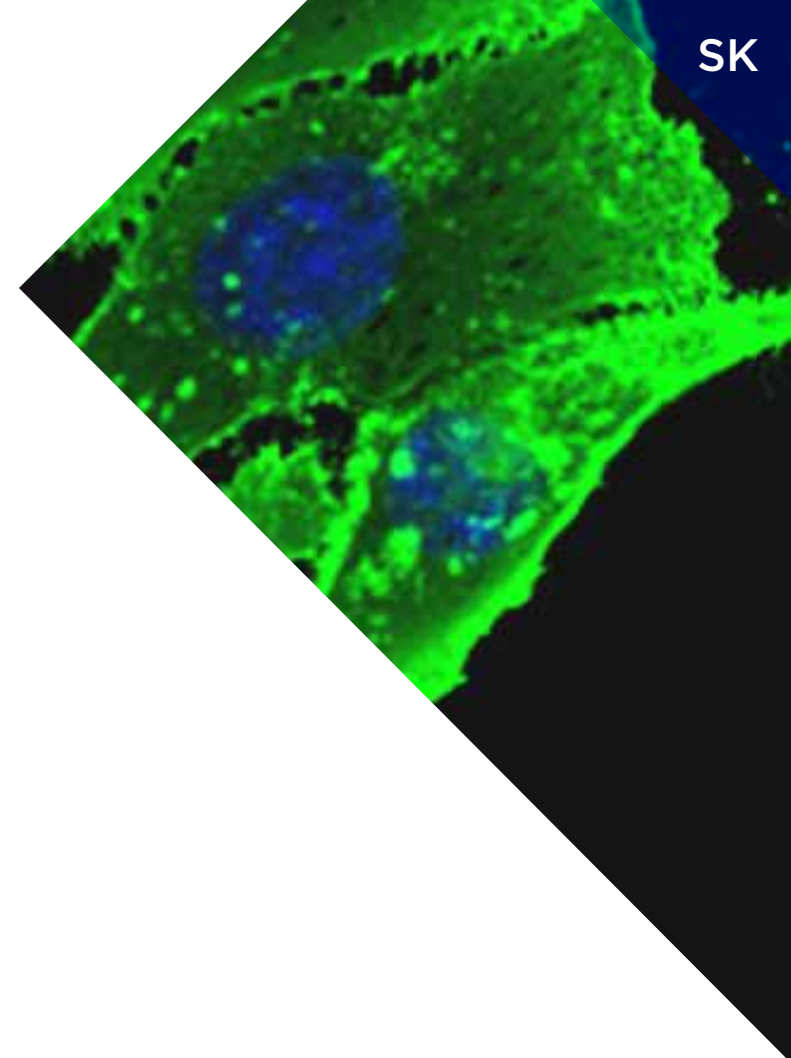


MINISTERSTVO
ŠKOLSTVA, VEDY,
VÝSKUMU A ŠPORTU
SLOVENSKEJ REPUBLIKY

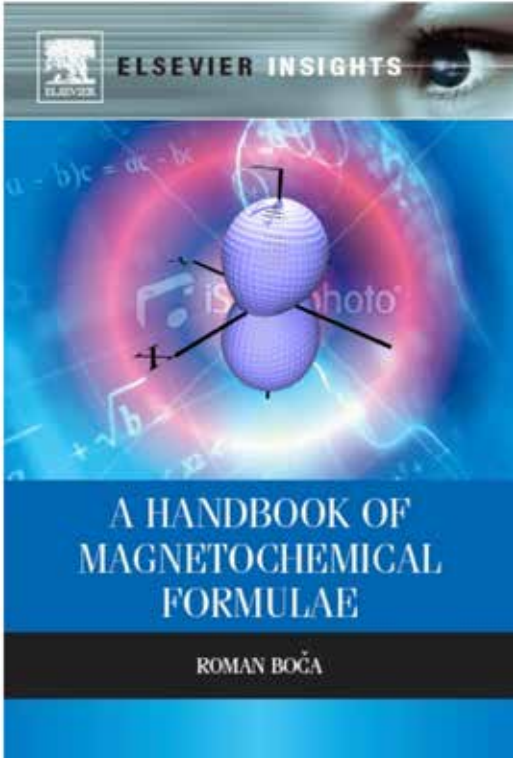
VYDANÉ V ROKU 2017

VÝSKUMNÉ PROJEKTY S VYNIKAJÚCOU ÚROVŇOU

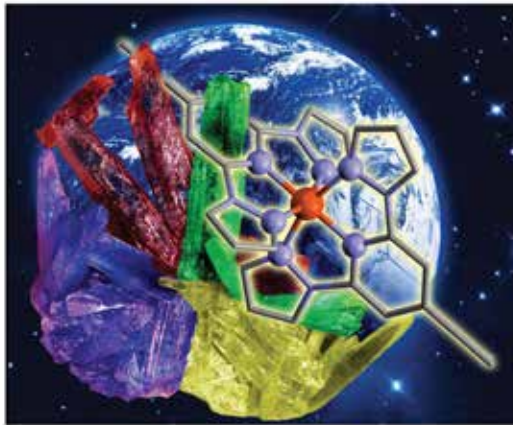
WWW.APVV.SK



SK



Monografia.



OD MAGNETOAKTÍVNYCH KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN K FUNKČNÝM MATERIÁLOM

Zodpovedný riešiteľ:
Riešiteľská organizácia:

Spoluriešiteľské organizácie:

Termín riešenia:
Finančné prostriedky z APVV:
Číslo projektu:

prof. Ing. Roman Boča, DrSc.
Fakulta chemickej a potravinárskej
technológie Slovenskej technickej univerzity v Bratislave
Fakulta prírodných vied Univerzity sv. Cyrila a Metoda v Trnave
Prírodovedecká fakulta Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
07/2012 – 12/2015
160 750 €
APVV-0014-11

Predmet výskumu

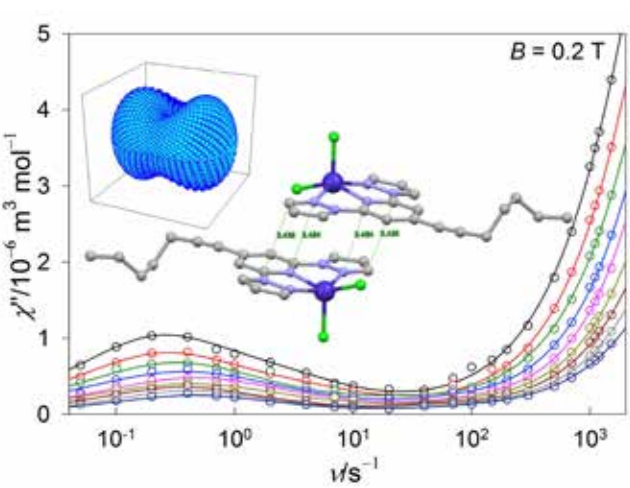
Projekt skúma nové fyzikálne javy spojené s nanomagnetizmom, na nových chemických objektoch. Predmetom aktivít je chemická syntéza viacjadrových komplexov prechodných kovov s prejavmi molekulového magnetizmu, jednomolekulového magnetizmu a spinových prechodov, nových modifikovaných organických feromagnetov a systémov s redukovanou dimenziou. Metodický postup sleduje reťazec: syntéza – analýza – štruktúra – magnetoaktivita – termoaktivita – detekcia – modifikácia – teoretický rozbor – pochopenie javov – optimalizácia – aplikácia. Výskum sa koná elementálnou a röntgenovou štruktúrnou analýzou, IR, UV/VIS, ESR, NMR a Mössbauerovou spektroskopiou, magnetometriou, susceptometriou, konduktometriou, kalorimetriou, fotomagnetizmom, teoretickými postupmi a metódami kvantovej chémie. Štúdium sa realizuje v teplotnej oblasti 2 – 400 K a v prípade potreby aj v subkelvinových alebo nadizbových teplotách. Kombináciou syntetických, analytických a diagnostických techník sa získa know-how pre vývoj nových magnetických materiálov s vysokou pridanou hodnotou využiteľných v zobrazovacej a záznamovej technike, vo fotonike a spintrionike. Súčasťou projektu je aj snaha posunúť hranice teoretickej interpretácie, s konečným cieľom nielen opísať, ale aj pochopiť vlastnosti materiálov a procesy v nich z funkčného hľadiska, ako aj navrhnuť ich optimalizáciu z hľadiska možnej technickej aplikácie.

Cieľ projektu

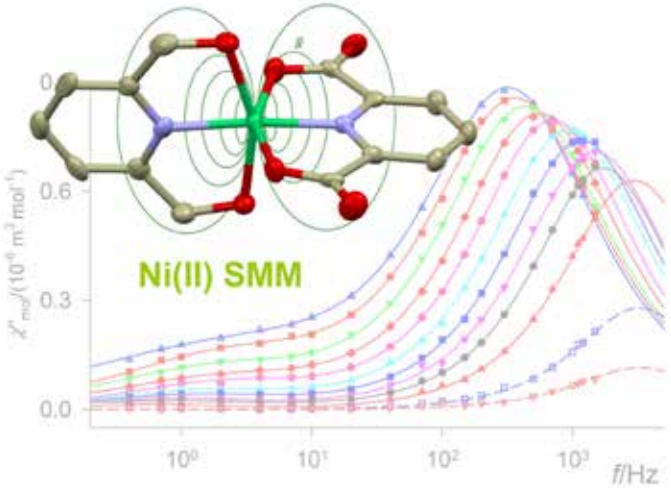
Výskum nanomagnetizmu zahrnujúci prípravu a charakterizáciu nanoskopických objektov prejavujúcich magnetoaktivitu. Objektmi štúdia sú viacjadrové komplexy prechodných kovov (Mn, Fe, Co, Ni), systémy s redukovanou dimenziou, magnetické reťazky a supramolekulové agregáty vrátane modifikovaných organických magnetov, získané pokročilou chemickou syntézou, ktoré vykazujú molekulový magnetizmus, zvýšenú magnetickú anizotropiu, spinový prechod a magnetokalorický efekt.

Prínos pre prax

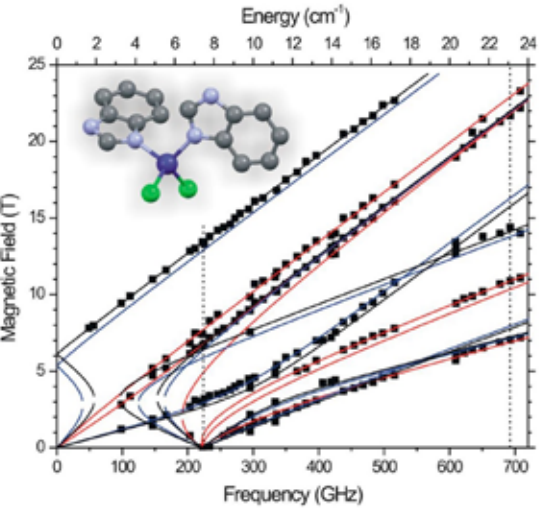
Projekt rieši úlohy základného výskumu v oblasti syntézy, analýzy, charakterizácie a uplatnenia koordinačných zlúčenín ako nových materiálov, hlavne jednomolekulových magnetov. Výsledky sa môžu uplatniť pri vývoji nových nanoelektronických a spintronických zariadení, ako prvky nových pamäťových a zobrazovacích jednotiek. V rámci riešenia projektu vzniklo 84 karentovaných publikovaní v prestížnych medzinárodných periodikách a 12 dizertačných prác. *Najvýznamnejšie publikácie*
BOČA, R.: *A Handbook of Magnetochemical Formulae*. Amsterdam : Elsevier, 2012, 1010 pp. Monografia.
IDEŠICOVÁ, M. – TITIŠ, J. – KRZYTEK – J. BOČA, R.: Zero-Field Splitting in Tetracoordinate Co(II) Com-



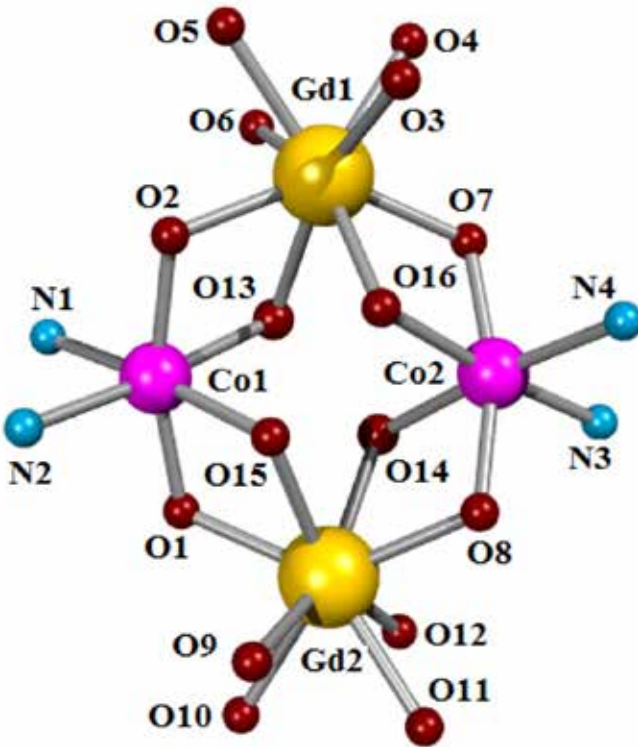
Pomalá magnetická relaxácia v pentakoordinovanom komplexe Co (II).



Pomalá relaxácia magnetizácie v prvom jednojadrovom komplexe Ni (II).



Vysokofrekvenčná/vysokopopolová elektrónová magnetická rezonancia.



Dosiahnuté výsledky

Chemickou syntézou sme pripravili rad nových koordinačných zlúčenín na báze centrálnych atómov Mn (II), Mn (III), Fe (II), Fe (III), Co (II), Ni (II), Cu (II) a Dy (III), pri ktorých bolo určené zloženie, kryštálová a molekulová štruktúra, namerané a interpretované molekulové spektrá a zmerané magnetické záznamové funkcie v DC a AC móde. Rad zlúčenín Fe (II) a Fe (III) vykazuje teplotou indukovaný spinový prechod v rôznych oblastiach teploty prechodu, ako aj fotomagnetické javy (LIESST, LITH). Niektoré zlúčeniny Co (II), ale aj Ni (II) a Dy (III) sú jednomolekulové magnety (SMM) s jedným, dvoma aj tromi pomalými relaxačnými procesmi. Napomáha tomu výrazná magnetická anizotropia, ktorá bola podrobne študovaná pri jednojadrových komplexoch Co(II) a Ni(II), čo vyústilo do formulácie magnetoštruktúrnych D-korelácií. Popri nich sa prehľadili poznatky o magnetoštruktúrnych J-koreláciách.