



Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-0528-11**

Fyzikálne a elektrochemické správanie mechanochemicky pripravených nanooxidov

Zodpovedný riešiteľ **Prof. RNDr. Vladimír Šepelák, DrSc.**

Príjemca **Ústav geotechniky, Slovenská akadémia vied**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Ústav geotechniky, Slovenská akadémia vied
2. Ústav merania, Slovenská akadémia vied
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe, Nemecko
2. Leibniz Universität Hannover, Hannover, Nemecko
3. Technische Universität Graz, Graz, Rakúsko

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. V. Šepelák, A. Düvel, M. Wilkening, K.-D. Becker, P. Heitjans, Mechanochemical reactions and syntheses of oxides. *Chemical Society Reviews* 42 (2013) 7507–7520.
(2014 impakt faktor: 33,383)
2. V. Šepelák, M. Myndyk, M. Fabián, K. L. Da Silva, A. Feldhoff, D. Menzel, M. Ghafari, H. Hahn, P. Heitjans, K. D. Becker, Mechanochemical synthesis of nanocrystalline fayalite, Fe₂SiO₄. *Chemical Communications* 48 (2012) 11121–11123.
(2014 impakt faktor: 6,834)
3. V. Šepelák, M. Myndyk, R. Witte, J. Röder, D. Menzel, R. H. Schuster, H. Hahn, P. Heitjans, K.-D. Becker, The mechanically induced structural disorder in barium hexaferrite, BaFe₁₂O₁₉, and its impact on magnetism. *Faraday Discussions* 170 (2014) 121–135.

(2014 impakt faktor: 4,606)

4. V. Šepelák, S. Begin-Colin, G. Le Caër, Transformations in oxides induced by high-energy ball-milling. Dalton Transactions 41 (2012) 11927–11948.

(2014 impakt faktor: 4,197)

5. M. Fabián, P. Bottke, V. Girman, A. Düvel, K. L. Da Silva, M. Wilkening, H. Hahn, P. Heitjans, V. Šepelák, A simple and straightforward mechanochemical synthesis of the far-from-equilibrium zinc aluminate, $ZnAl_2O_4$, and its response to thermal treatment. RSC Advances 5 (2015) 54321–54328.

(2014 impakt faktor: 3,840)

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu je možné využiť v aplikovanom výskume alebo v praxi v nasledovných smeroch:

- mechanochemické metódy možno využiť pri príprave nových nanoštruktúrnych materiálov;
- nanooxidy vykazujúce nezvyčajné magnetické vlastností možno využiť v biologických alebo medicínskych aplikáciách;
- nanokryštalické mechosyntetizované oxidy možno využiť ako aktívne elektródové materiály pre Li-iónové batérie;
- prototypy vyvinutých vysoko-energetických mlynov sú vhodné na veľkoobjemovú syntézu a mechanickú aktiváciu materiálov.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Nekonvenčnými mechanochemickými metódami boli pripravené nové vysoko-nerovnovážne nanooxidy. Boli určené rýchlosť-determinujúce kroky mechanochemických reakcií vedúce k tvorbe metastabilných oxidov a objasnená podstata tvorby tzv. "core-shell" morfológie mechosyntetizovaných oxidických nanočastíc. Bola získaná kvantitatívna informácia o nerovnovážnej kationovej distribúcii, nekolineárnom spinovom usporiadaní, metastabilnej atómovej konfigurácii najbližších susedov a deformácii štruktúrnych polyedrov v nanooxidoch. Boli určené korelácie medzi nanoštruktúrou a magnetickým správaním mechosyntetizovaných oxidov. Metastabilné nanooxidy boli otestované ako elektródové materiály v Li-iónových batériach.

Vedecké ciele projektu boli splnené v plnom rozsahu. Výsledky projektu sú spracované v 19 publikáciách v zahraničných karentovaných časopisoch, v 1 práci v zahraničnom recenzovanom vedeckom časopise, v 1 bakalárskej práci a v 1 diplomovej práci. Vedecká kvalita výstupov je dokumentovaná aj napr. impakt faktorom karentovaných časopisov, v ktorých je väčšina výsledkov projektu zverejnená; dva články publikované v Chemical Society Reviews (impakt faktor: 33,383) slúžia k širokej disseminácii "first-rate" výsledkov základného výskumu v oblasti. Akceptácia výsledkov dosiahnutých v rámci projektu je doteraz dokumentovaná 155 SCI citáciami v zahraničných časopisoch. Významnými aplikačnými výsledkami projektu sú: (i) syntéza 13 nových materiálov zaradených do celosvetových databáz kryštalických štandardov a (ii) konštrukcia 2 prototypov vysoko-energetických mlynov.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

Nonconventional mechanochemical methods were used to prepare novel nonequilibrium nanooxides. Rate-determining steps of the mechanochemical formation reactions leading to metastable oxides were determined. The microscopic mechanism giving rise to the formation of the core-shell configuration in mechosynthesized nanoparticles was clarified. Quantitative information was obtained on nonequilibrium cation distribution, canted spin

arrangement, metastable nearest-neighbor atomic configuration, deformation of the polyhedron geometry in nanooxides. The interplay of nanostructure and magnetic behavior of mechanosynthesized oxides was established. Metastable nanooxides were tested as electrode materials for Li-ion batteries.

The aims of the project were accomplished. The achieved results have been published in 19 original papers in peer-reviewed scientific journals indexed in Current Contents, 1 article in peer-reviewed journal, 1 bachelor thesis, and 1 diploma thesis. The quality of outcomes of the research project is documented by, e.g., the ISI impact factor of the journals, in which the majority of achieved results has been disseminated; 2 papers are published in Chemical Society Reviews (impact factor: 33.383), which is the Royal Society of Chemistry's flagship reviews journal, publishing high-impact articles at the forefront of the chemical sciences. The acceptance of the results achieved within the project is documented by 155 SCI citations. From the point of view of applied research, the important results achieved comprise: (i) the synthesis of 13 novel materials included in the international databases of crystalline standards and (ii) the construction of 2 prototypes of high-energy mills.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Prof. RNDr. Vladimír Šepelák, DrSc.

V Košiciach 28. 01. 2016

Štatutárny zástupca príjemcu

Ing. Slavomír Hredzák, PhD.

V Košiciach 28. 01. 2016

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu