

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **VVCE-0004-07**
Magnetoaktivita, elektroaktivita a fotoaktivita koordinačných zlúčenín

Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Roman Boča, DrSc.**
Príjemca **Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie
2. Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Fakulta prírodných vied
3. Slovenská akadémia vied, Ústav anorganickej chémie v Bratislave
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Technická univerzita Darmstadt, SRN
2. Univerzita Wurtzburg, SRN
3. Leibnitz Universitat Hannover, SRN

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. Monografia - R. Boča: A Handbook of Magnetochemical Formulae, Elsevier, Amsterdam, 2012, 990 pp.
2. J. Titiš, R. Boča: Inorg. Chem. 50 (2011) 11838-11845. Magnetostructural D Correlations in Hexacoordinated Cobalt(II) Complexes.
3. S. Komorovský, M. Repiský, O.L. Malkina, V.H. Malkin: The Journal of Chemical Physics 132 (2010) 154101 (1-8). Fully relativistic calculations of NMR shielding tensors using restricted magnetically balanced basis and gauge including atomic orbitals
4. R. Boča, I. Šalitraš, J. Kožíšek, J. Linares, J. Moncol, F. Renz: Dalton Transaction 39 (2010) 2198 - 2200. Spin crossover in a heptanuclear mixed-valence iron complex

5. V. Semenaka, O. V. Nesterova, V.N. Kozoy, V. V. Dyakonenko, R. I. Zybalyuk, O. V. Shishkin, R. Boca, J. Jezierska, A. Ozarowski: Inorganic Chemistry 49 (2010) 5460–5471. Cr(III)-Cr(III) Interactions in Two Alkoxo-Bridged Heterometallic Zn₂Cr₂ Complexes Self-Assembled from Zinc Oxide, Reinecke's salt and Diethanolamine.

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu sú prevažne charakteru základného výskumu. Obohacujú poznanie vo viacerých vedných disciplínach, ako sú anorganická chémia, analytická chémia, fyzikálna chémia, spektroskopia, magnetochemia, magnetofyzika, kvantová chémia. Penetrujú aj do učebných plánov vysokoškolského štúdia. Nové pripravené látky a materiály majú aplikačný potenciál v oblasti záznamových, zobrazovacích a pamäťových médií.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

V projekte sa študovali nové javy na nových chemických látkach. Pokročilou organickou/anorganickou syntézou sa pripravili nové ligandy, jednojadrové prekurzory, viacjadrové komplexy prechodných kovov a z nich zložené funkčné materiály. Použitím analytických a diagnostických techník sa stanovilo ich zloženie, kryštalová a molekulová štruktúra, metódami molekulovej spektroskopie sa určili základné spektrálne charakteristiky, fyzikálno-chemickými technikami sa študovala termoaktivita, magnetoaktivita, elektroaktivita a fotoaktivita pripravených materiálov a teoretickými postupmi analyzovali experimentálne dáta. Pripravené materiály prejavujú: a) teplotou indukovaný spinový prechod spojený s termochromizmom, fázovým prechodom a hysteréziou, pričom spinový prechod významne interferuje s magnetickou výmennou interakciou, b) supramolekulové usporiadanie, umožňujúce výmennú interakciu, molekulový magnetizmus, magnetickú anizotropiu a magnetické usporiadanie. Významným výsledkom projektu je vybudovanie modernej infraštruktúry výskumu materiálov, ako je laboratórium SQUID magnetometrie s možnosťou fotomagnetizmu, laboratória nízkoteplotnej kalorimetrie, a laboratória elektrochemie, ďalej vývoj nových teoretických modelov a programových balíkov k opisu pozorovaných vlastností a javov, ako aj intenzívna medzinárodná spolupráca. Experimentálny výskum vyústil do prípravy a charakterizácie nových koordinačných zlúčenín a materiálov, ktorých štruktúra, termoaktivita, magnetoaktivita, elektroaktivita a fotoaktivita obohatila stupeň poznania v príslušnej a príbuzných vedných disciplínach (anorganická chémia, analytická chémia, fyzikálna chémia, spektroskopia, magnetochemia, magnetofyzika, kvantová chémia).

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

New phenomena have been investigated on new chemical compounds in the project. By advanced organic/inorganic synthesis new ligands, then mononuclear precursors, polynuclear transition metal complexes and from them assembled functional materials have been prepared. Using analytical and diagnostic techniques their composition and structure were determined, by molecular spectroscopy methods the basis spectral characteristics were identified, by applying physico-chemical techniques the thermoactivity, magnetoactivity, electroactivity and photoactivity of prepared materials were studied and by theoretical approaches the experimental data were analyzed. The prepared materials show: 1) a thermally induced spin transition accompanied by the thermochromism, phase transition and hysteresis, that in the case of polynuclear complexes strongly interferes with the magnetic exchange interaction; 2) a supramolecular packing that facilitates exchange interactions, molecular magnetism, magnetic anisotropy, and magnetic ordering. An important result is the progress in the modern infrastructure of the material research, such as the laboratory of SQUID magnetometry, low-temperature calorimetry, and electrochemistry along with development of new theoretical models and program packages for description of registered properties and phenomena side by side with an intense international collaboration. The

experimental research resulted in preparation and characterization of new coordination compounds and materials whose structure, thermoactivity, magnetoactivity, electroactivity and photoactivity enriched the degree of knowledge in various scientific disciplines such as inorganic chemistry, analytical chemistry, physical chemistry, spectroscopy, magnetochemistry, magnetophysics and quantum chemistry.

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

Zodpovedný riešiteľ

prof. Ing. Roman Boča, DrSc.

V Bratislave 10.01.2012

Štatutárny zástupca príjemcu

prof. Ing. Robert Redhammer, PhD

V Bratislave 10.01.2012

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu