



## Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

**0014-11**

**Od magnetoaktívnych koordinačných zlúčenín k funkčným materiálom**

Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Roman Boča, DrSc.**

Príjemca

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

### Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave
2. Fakulta prírodných vied, Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave
3. Prírodovedecká fakulta, Univerzita P.J. Šafárika v Košiciach
- 4.
- 5.

### Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Nemecko
2. Taras Shevchenko University of Kiiv, Ukrajina
3. National High Magnetic Field Laboratory, Tallahaasee, Florida, USA

### 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. R. Boča: A Handbook of Magnetochemical Formulae. Elsevier, Amsterdam, 2012, 1010 pp. Monografia
2. M. Idešicová, J. Titiš, J. Krzystek, R. Boča: Inorganic Chemistry 52 (2013) 9409–9417. Zero-Field Splitting in Tetracoordinate Co(II) Complexes: a Structural, Magnetic, High-Frequency and -Field EPR, and Theoretical Study.
3. C. Rajnák, J. Titiš, R. Boča, O. Fuhr, M. Ruben: Inorganic Chemistry 53 (2014) 8200–8202. Single-molecule magnetism in a mononuclear pentacoordinate Co(II) complex supported by an antenna ligand.
4. R. Boča, J. Mikovič, J. Titiš: Inorganic Chemistry 53 (2014) 2367-2369. Simple

Mononuclear Cobalt(II) Complex: A Single-Molecule Magnet Showing Two Slow Relaxation Processes.

5. J. Miklovič, D. Valigura, R. Boča, J. Titiš: Dalton Transaction 44 (2015) 12484–12487.  
Mononuclear Ni(II) Complex: A Field Induced Single-Molecule Magnet Showing Two Slow Relaxation Processes.

### **Uplatnenie výsledkov projektu**

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 mikro/nano-elektronických zariadení, ako prvky nových pamäťových a zobrazovacích jednotiek.

### **CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV**

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

Chemickou syntézou sa pripravil 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, kryštalová 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 troma pomalými relaxačnými procesmi. Napomáha tomu výrazná magnetická anizotropia, ktorá bola podrobne študovaná pri jednojadrových komplexoch Co(II) a Ni(II), čo vyústilo k formulácii magnetoštruktúrnych D-korelácií. Popri nich sa prehĺbili poznatky o magnetoštruktúrnych J-koreláciách.

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

A series of new coordination compounds based upon the central atoms Mn(II), Mn(III), Fe(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II) and Dy(III) has been synthesized. These objects were characterized by their composition, crystal and molecular structure, and the molecular spectra. In addition, the magnetic functions taken in the DC and AC mode were interpreted. A number of Fe(II) and Fe(III) compounds show a thermally induced spin crossover with various critical temperature; also the photomagnetic phenomena (LIESST, LITH) were studied. Some compounds of Co(II), Ni(II) and Dy(III) behave as single molecule magnets (SMM) with a single, two, or three slow relaxation processes. This behavior is supported by a substantial magnetic anisotropy that has been studied in detail for mononuclear Co(II) and Ni(II) complexes resulting in formulation of magnetostructural D-correlations. Also the classical magnetostructural J-correlations were investigated.

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 20.1.2016

**Štatutárny zástupca príjemcu**

prof. Ing. Ján Šajbidor, DrSc.

V Bratislave 20.1.2016

.....  
podpis zodpovedného riešiteľa

.....  
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu