

Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-0728-07**Vzťahy medzi štruktúrou a vlastnosťami nanokryštalických komplexných oxidov pripravených mechanochemickými metódami**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. Letecká fakulta, Technická univerzita v Košiciach
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Nemecko
2. Leibniz Universität Hannover, Hannover, Nemecko
3. Akademie věd České republiky, Praha, Česká republika

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, I. Bergmann, S. Indris, A. Feldhoff, P. Heitjans, K. D. Becker, Mechanically induced changes in local structure of spinel oxides studied by spectroscopic methods. In: Experimental and Theoretical Studies in Modern Mechanochemistry. F. Delogu, G. Mulas (Editors), Transworld Research Network, Kerala, India, 2010, pp. 191–206 (ISBN 978-81-7895-454-7).
2. V. Šepelák, K. D. Becker, I. Bergmann, S. Suzuki, S. Indris, A. Feldhoff, P. Heitjans, C. P. Grey, A one-step mechanochemical route to core-shell Ca₂SnO₄ nanoparticles followed by ¹¹⁹Sn MAS NMR and ¹¹⁹Sn Mössbauer spectroscopy. Chemistry of Materials 21 (2009) 2518–2524. (5,368 – IF2009)

3. A. Mockovčiaková, Z. Orolínová, J. Škvarla, Enhancement of the bentonite sorption properties. *Journal of Hazardous Materials* 180 (2010) 274–281. (4,144 – IF2009)
4. O. Hudák, Quantum critical phenomena, entanglement entropy and Hubbard model in 1d with the boundary site with a negative chemical potential $-p$ and the Hubbard coupling U positive. *Physics Letters A* 373 (2009) 359–362. (2,174 – IF2008)
5. O. Kaman, P. Veverka, Z. Jiráček, M. Maryško, K. Knížek, M. Veverka, P. Kašpar, M. Burian, V. Šepelák, E. Pollert, The magnetic and hyperthermia studies of bare and silica-coated $\text{La}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{MnO}_3$ nanoparticles. *Journal of Nanoparticle Research* (2010), DOI: 10.1007/s11051-010-0117-x. (2,478 – IF2009)

Uplatnenie výsledkov projektu

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

- nekonvenčnú mechanosyntézu možno využiť ako jednostupňový preparačný postup prípravy nanomateriálov;
- širokú paletu nových magnetických vlastností nanooxidov je možné využiť v ich biologických alebo medicínskych aplikáciách;
- substituované nano-hexaferity a -perovskity možno využiť ako absorbery mikrovlnného žiarenia, resp. ako membránové materiály;
- prírodný bentonit modifikovaný magnetickými oxidickými nanočasticami možno využiť ako efektívny sorbent toxických kovov z vôd s nízkou koncentráciou kovov.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

Nanokryštalické komplexné oxidy boli pripravené nekonvenčnými jednostupňovými mechanochemickými metódami (mechanosyntézou a mechanickou aktiváciou odpovedajúcich objemových materiálov) a kombinovanými preparačnými postupmi, zahŕňajúcimi mechanochemický proces. Oxidické nanočastice majú neuniformnú tzv. core-shell morfológiu pozostávajúcu zo štruktúrne usporiadaných oblastí obklopených neusporiadanými povrchovými vrstvami/rozhraniami. Štruktúrne neusporiadanie nanooxidov je charakterizované nerovnovážnou kationovou distribúciou, deformovanou kyslíkovou podmriežkou, metastabilnými atómovými konfiguráciami a nekolineárnym spinovým usporiadaním. V dôsledku nerovnovážnych štruktúrnych konfigurácií vykazujú nanooxidy nezvyčajné funkčné vlastnosti, ktorých fundamentálna podstata bola teoreticky vysvetlená. Následná termická úprava nanoštruktúrnych oxidov spôsobuje ich prechod z metastabilného do nízko-energetického kryštalického stavu; štruktúrne-relaxačný proces je sprevádzaný rastom veľkosti oxidických častíc a zánikom ich výnimočných vlastností.

Vedecké ciele projektu boli splnené v plnom rozsahu. Výsledky projektu sú spracované v 4 príspevkoch v zahraničných knižných publikáciách, v 20 článkoch v karentovaných časopisoch, v 8 prácach v recenzovaných vedeckých časopisoch a v 3 príspevkoch v zborníkoch. Vedecká kvalita výstupov projektu je dokumentovaná aj napr. impakt faktorom (IF) karentovaných časopisov, v ktorých je väčšina výsledkov projektu zverejnená; 11 vedeckých prác je publikovaných v časopisoch s $2 < \text{IF} \leq 8,58$. Akceptácia výsledkov dosiahnutých v rámci projektu je dokumentovaná 54 citáciami v zahraničných časopisoch.

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

Nanocrystalline complex oxides were prepared by non-conventional one-step mechanochemical methods (mechanosynthesis and mechanical activation of the corresponding bulk materials) and by combined techniques involving the mechanochemical process. Oxide nanoparticles possess a non-uniform core-shell morphology consisting of

structurally ordered regions surrounded by disordered surfaces/interfaces. Structural disorder of nanooxides is characterized by a non-equilibrium cation distribution, a deformed oxygen sublattice, a metastable atomic configuration and a non-collinear spin arrangement. As a consequence of the non-equilibrium structure, nanooxides exhibit unusual functional properties, whose origin has been explained. The subsequent thermal treatment of nanostructured oxides causes their transition from the metastable to a low-energy crystalline state; the structural relaxation process is accompanied by the growth of nanoparticles and the disappearance of their unique properties.

The aims of the project were accomplished. The achieved results have been published in 4 contributions to books, 20 original papers in peer-reviewed scientific journals indexed in Current Contents, 8 articles in peer-reviewed journals, and in 3 contributions to the conference proceedings. The quality of outcomes of the research project is documented by, e.g., the ISI impact factor (IF) of the journals, in which the majority of achieved results has been disseminated; 11 articles have been published in the scientific journals with $2 < IF \leq 8,58$. The acceptance of the results achieved within the project is documented by 54 SCI citations.

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 26. 01. 2011

Štatutárny zástupca príjemcu

Prof. Ing. Vítázoslav Krúpa, DrSc.

V Košiciach 26. 01. 2011

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu