

## Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-14-0073****Magnetokalorický jav v kvantových a nanoskopických systémoch**Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Martin Orendáč, CSc.**Príjemca **Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach - Prírodovedecká fakulta**

### Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach  
Slovenská technická univerzita v Bratislave-fakulta chemickej a potravinárskej technológie  
Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave - Fakulta prírodných vied

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

- Laboratoire de Chimie de Coordination, Toulouse Francúzsko
- Faculty of Science, University of Lisbon, Portugalsko
- Palackého univerzita Olomouc, Česká republika
- Central European Institute of Technology Brno, Česká republika
- Universidade Federal de Alagoas, Brazília
- Universidade Federal de Lavras, Brazília
- Department of Chemistry, National Institute of Technology (NIT) Patna, India
- Department of Chemistry, University of Calcutta, India.
- School of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan, People's Republic of China.
- Institut de Chimie de Strasbourg, Université de Strasbourg, France
- Energy Technologies Research Institute, University of Nottingham, Veľká Británia
- Department of Chemistry, IISER Bhopal, India.
- Vysoká škola chemickotechnologická, Praha, Česká republika

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

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

A. Orendáčová, R. Tarasenko, V. Tkáč, E. Čižmár, M. Orendáč, A. Feher, Interplay of Spin and Spatial Anisotropy in Low-Dimensional Quantum Magnets with Spin 1/2, Crystals 9 (2019) 6. DOI: 10.3390/cryst9010006.

I. Šalitroš, J. Pavlík, Light-induced excited spin state trapping, Encyclopedia of Physical Organic Chemistry, 6 Volume set, Wiley (2017), ISBN: 978-1-118-47045-9.

J. Strečka, M. Jaščur, A brief account of the Ising and Ising-like models: mean-field, effective field and exact results, Acta Phys. Slovaca 65 (2015) 235.

## **Uplatnenie výsledkov projektu**

Riešenie projektu prinieslo nové poznatky v metódach pokročilej syntézy koordinačných chemických zlúčenín. Boli zavedené a zvládnuté nové technologické postupy prípravy nanočasticových a mikročasticových objektov, ktoré majú zaujímavé magnetokalorické vlastnosti, získané know-how je využiteľné pri príprave ďalších tried nanoštruktúr. Použitím rôznych teoretických prístupov boli preskúmané magnetokalorické odozvy nových typov geometricky frustrovaných magnetík so zvýšeným magnetokalorickým javom, bude vyvíjané úsilie o syntézu navrhnutých systémov.

Riešenie projektu vyvolalo záujem slovenských firiem o metódu magnetického chladenia. Konkrétnejšie, firma Cryosoft s. r. o. iniciovala spoluprácu s Ústavom fyzikálnych vied, Prírodovedeckej fakulty, Univerzity P. J. Šafárika v Košiciach v oblasti vývoja prvkov pre chladiace zariadenia pre oblasť héliových teplôt, spolupráca vyústila do podania spoločného výskumno - vývojového projektu. Obdobne, v súčasnosti prebiehajú diskusie s firmou BSH s. r. o. (Bosch group) ohľadne možnej spolupráce v oblasti vývoja novej generácie magnetických refrigerantov a ich praktického použitia.

Na základe nami získaných výsledkov štúdia magnetokalorického javu v kvantových spinových reťazcoch laboratórium "large B/T facility" na University of Florida, Gainesville U.S.A. skúma možnosť použitia spinových reťazcov ako prvku v zostave pre získavanie veľmi nízkyh teplôt vo vysokých magnetických poliach.

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

Riešenie tém navrhnutých v jednotlivých aktivitách projektu prinieslo rad originálnych výsledkov, ktoré posúvajú hranice poznania v oblasti termodynamických a transportných vlastností nových kvantových a nanoskopických systémov. Teoreticky boli navrhnuté nové geometricky frustrované systémy s výraznou magnetokalorickou odozvou, bola ukázaná anomálna frustrácia podporená magnetoelastickou interakciou. Zvládli sa nové technológie pri príprave nanoskopických a mikroskopických systémov, ktoré vykazujú zvýšený magnetokalorický jav ako nanočastice typu jadro-obal, nanočastice zabudované do pórovitej SiO<sub>2</sub> matrice ako aj NiPt<sub>3</sub> častice usporiadané na vhodných podložkách. Pokročilou syntézou boli pripravené nové zlúčeniny pre štúdium magnetoštruktúrnych korelácií ako napríklad jedno- a viacjadrové komplexy na báze Fe(III) s rôznou mierou distorzie okolia magnetického iónu. Vďaka riešeniu projektu bola zvládnutá predpoveď magnetických vlastností Ni(II) monomérov iba na základe detailnej analýzy ich štruktúry. Experimentálne boli potvrdené predpovede pre výrazný inverzný magnetokalorický jav v kvantových reťazcoch s Haldanovým gapom ako aj gigantický rotačný magnetokalorický jav spôsobený jednoiónovou anizotropiou. Boli preskúmané mechanizmy tepelnej vodivosti vo vybraných nízkorozmerných magnetických systémoch. Bola vyjasnená pomalá magnetická relaxácia vybraných kvázidvojmerných magnetík na báze vzácnych zemín spôsobená kryštálovým poľom, systematicky bol skúmaný vplyv kryštálovopoľnej anizotropie na magnetokalorickú odozvu. Štúdium magnetickej relaxácie poukázalo na podstatnú úlohu tzv. efektu zúženého fonónového hrdla, ktorého neuváženie môže viesť k nefyzikálnym záverom.

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

Solving goals formulated in the proposed workpackages of the project led to the number of original results, which shift the borders of our knowledge in the field of thermodynamic and transport properties of novel quantum and nanoscopic systems. More specifically, novel geometrically frustrated magnetic systems were proposed theoretically. Anomalous frustration enhanced by magnetoelastic coupling was revealed. New technologies have been implemented for the preparation of nanoscopic and microscopic systems displaying enhanced magnetocaloric effect like core-shell magnetic nanoparticles, nanoparticles embedded in porous SiO<sub>2</sub> matrix and NiPt<sub>3</sub> particles arranged on appropriate substrates. Advanced techniques for syntheses were adopted for the preparation of new Fe(III) based compounds with various degree of the deformation of the surroundings of the Fe(III) magnetic ion. Effort developed in the framework of the project led to successful prediction of magnetic properties of Ni(II) monomers exclusively from the detailed analysis of their structural properties. Theoretical predictions for enhanced magnetocaloric effect due to closing Haldane gap in quantum spin chains and giant magnetocaloric effect due to single-

ion anisotropy were experimentally confirmed. Mechanisms governing thermal conductivity in selected low-dimensional systems have been clarified. Slow magnetic relaxation in some rare-earth based systems have been observed and attributed to crystal-field anisotropy, the effect of the crystal-field anisotropy on magnetocaloric response was investigated systematically. The investigation of magnetic relaxation confirmed a substantial role of phonon bottleneck effect, which, if not taken into account, may lead to non-physical conclusions from the data analysis.