

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV -0201-11**
Prechod do antiadiabatického stavu – kľúčový fyzikálny efekt pre predikciu nových supravodičov

Zodpovedný riešiteľ **doc. Ing. Pavol Baňacký, DrSc**
Príjemca **Univerzita Komenského v Bratislave, konajúci: prof. RNDr. Karol Mičieta, PhD., rektor UK, v zastúpení: doc. RNDr. Milan Trizna, PhD., dekan PriF UK**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Prírodovedecká fakulta UK, Chemický Ústav PriRF UK, oddelenie Chemickej fyziky
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

- 1.
- 2.
- 3.

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. P. Baňacký et al., Toward possibility of high-temperature bipolaronic superconductivity in boron tubular polymorph: Theoretical aspects of transition into anti-adiabatic state, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 73, 1044-1054 (2012)
2. P. Baňacký et al., pozvaná prednáška na konferencii: SUPERSTRIPES 2012, Erice, Italy, July 11-17, 2012 - "Electron-vibration coupling in boron nanotubes"
3. P. Baňacký et al., Electronic Structure of Single-Wall Silicon Nanotubes and Silicon Nanoribbons: Helical Symmetry Treatment and Effect of Dimensionality, Advances in

4. P. Banacky et al., pozvaná prednáška na konferencii: Electron Correlation in Nanostructures (ECN-2013), The International Conference, Yalta, Ukraine, 3 - 6 October 2013 - "Electronic structure of boron and silicone nanotubes: Perspective materials for nanotechnologies"
5. J. Šimunek et al., prezentácia-pozvaný poster na: The 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, December 2-6, 2013, Todai-ji Culture Center, Nara, Japan - "New Orbital Optimization Approach via Thouless Theorem "
6. M. Melicherčík et al., prezentácia-pozvaný poster na: MOLCAS Developers' workshop 2014, 24th-26th March 2014, Alcalá de Henares, Madrid, Spain - "Implementation of CCSD(T) on GPGPU: Simulation of non-iterative triple excitation"
7. J. Noga et al., pozvaná prednáška na: Frontiers in Electronic Structure Theory 2015, 26-28 May, 2015, Goa, India - "Use of the helical-screw symmetry in the calculation of nanotubes: application in structural aspects and stability of superconducting nanotubular MgB₂"
8. P. Baňacký et al., Electronic Structure of Boron Nanotubes: Perspective Material for Nanotechnologies, Quantum Matter Vol.4, No.4, 367–372, 2015 / doi:10.1166/qm.2015.1208
9. P. Baňacký et al., Large diameter multiwall nanotubes of MgB₂: Structural aspects and stability of superconducting nanotubular magnesium boride, Physica Status Solidi B Vol. 252, No. 9, 2052–2058 (2015) / DOI 10.1002/pssb.201552027
10. P. Baňacký, On mechanism of high-temperature superconductivity in hydrogen sulfide at 200 GPa: transition into superconducting anti-adiabatic state in coupling to H-vibrations, Results in Physics 6, 1 (2016); <http://dx.doi.org/10.1016/j.rinp.2015.11.011>
11. P. Baňacký et al., Microscopic insight on the pump-probe relaxation dynamics of superconductors: Model study of MgB₂ relaxation within nonlinear response theory, Physica Status Solidi B (2015), (pssb.201552571), (arXiv:1508.03962). Dňa 21.12.2015 bol rukopis (pssb.201552571) akceptovaný k publikovaniu (DOI 10.1002/pssb.201552571).
12. P. Baňacký et al., prezentácia-pozvaný poster na: The 11 International Conference on Materials and Mechanism of superconductivity, Geneva, Switzerland, 23-28 August, 2015 - "New superconducting polymorph of MgB₂: Large diameter multiwall nanotubes of MgB₂"
13. P. Baňacký et al., pozvaná prednáška na konferencii: Quantum Systems in Chemistry and Physics – QSCP2015, September 14-20, 2015, Varna, Bulgaria - "Single and multi-wall nanotubes of boron and metal-borides: stability, electronic structure and aspects of superconductivity"
14. P. Baňacký, pozvaná prednáška na jubilejnú konferenciu venovanú supravodivosti: SUPERSTRIPES 2016, Quantum In Complex Matter, June 23-28, 2016, Ischia, Italy - Excited states relaxation dynamics of superconductors and microscopic mechanism of superconducting state transition.

Uplatnenie výsledkov projektu

Základný výskum. Výsledky vytvárajú teoretickú bázu pre možnosť vytvorenia expertného vypočtového systému predikcie supravodičov.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

Stanovené ciele projektu boli splnené. Na báze nami formulovanej anti-adiabatickej teórie elektrón-vibračných interakcií, ktoré indukujú prechod systému z adiabatického do antiadiabatického supravodivého stavu, sme predikovali štruktúru a supravodivé vlastnosti nasledovných materiálov; 1/ jednotenné nanotrúbky (SWNT) bóru s B8 štruktúrou jednotkovej bunky (8B/hP-u.c.). NT s priemerom $d > 15 \text{ \AA}$ sú supravodivé a pre $d \sim 39 \text{ \AA}$ je vypočítaná kritická

teplota $T_c \sim 40$ K. 2/ inkorporácia atómu kovu Me stabilizuje SWNT štruktúru a má vplyv na supravodivé vlastnosti. Pre $Me=Mg$, vypočítaná kritická teplota je $T_c \sim 70-90$ K a pre $Me=Ca$ je $T_c \sim 103$ K. Pri inkorporácii $Me=Al$, resp. Be dochádza k potlačeniu supravodivosti.

3/ SWNT štruktúry kremíka (Si) sme predikovali bez prechodu do supravodivého stavu. Sú to polovodiče s malou energetickou medzerou, ktorá je dobre kontrolovateľná priemerom NT.

Z hľadiska aplikačného potenciálu je zásadnou predikcia stability a supravodivých vlastností mnohostenných nanotrubiiek (MWNT) MgB_2 . 4/ Ukázali sme, že už 25-stenná MgB_2 - NT dosahuje stabilitu bulk štruktúry MgB_2 a kritická teplota je $T_c \sim 40$ K. Pre rozvoj samotnej teórie supravodivosti je dôležitým výsledkom fakt, že na rozdiel od štandardných teórií (BCS, Eliashberg,..), je anti-adiabatická teória supravodivosti schopná korektne popísať: 5/ supravodivosť H_2S pri 200 GPa s kritickou teplotou $T_c \sim 203$ K a 6/ dynamiku excitovaného stavu supravodiča s náhlym nárastom relaxačného času pri T_c , tak ako je to experimentálne merané pri T-závislých pump-probe experimentoch. V projekte vyvinutá a výpočtovo implementovaná helikálna metóda tvorby NT je kľúčová pre teoretické štúdium NT s komplexnou štruktúrou.

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

Projected goals of the research have been fulfilled. Based on the anti-adiabatic theory of electron-vibration interactions, which induce transition from adiabatic into superconducting anti-adiabatic state, we have predicted structure and superconductivity of the following materials; 1/ boron-based single-wall nanotubes (SWNT) with B8 structure of unit cell (B8-hP/u.c.). Superconducting are B-SWNT with diameter $d > 15$ Å and for NT with diameter $d \sim 39$ Å, calculated critical temperature is $T_c \sim 40$ K. 2/ Incorporation of metal (Me) atom into tubular structure increases stability of NT and influences superconductivity. For $Me=Mg$, calculated T_c is 70-90 K and for $Me=Ca$, T_c is higher and reaches 103 K. In case of incorporation of $Me=Al$, or $M=Be$, superconductivity of SWNT is suppressed. On the other hand, 3/ we have predicted that SWNT of silicon (Si) are not superconductors, but semiconductors with small gap which can be tuned through diameter of NT. From application stand point, the crucial is prediction of stability and superconductivity of multi-wall nanotubes (MWNT) of MgB_2 . 4/ We have shown that already 25-wall MgB_2 -NT reaches stability of the bulk MgB_2 and calculated critical temperature is $T_c \sim 40$ K. As far the development of theory of superconductivity is concerned, crucial are results which show that in contrast to standard theories (e.g. BCS, Eliashberg,..), the anti-adiabatic theory correctly describes: 5/ superconductivity of H_2S pressurized at 200GPa with $T_c \sim 203$ K and 6/ sudden increase of relaxation time near T_c for T-dependent excited state dynamics of superconductors as detected by pump-probe experiments. The helical method of NT formation, as developed and implemented in the project, is crucial for theoretical study of NT with a complex structure.

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

Zodpovedný riešiteľ

doc. Ing. Pavol Baňacký, DrSc

V Bratislava 18. 01. 2016

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

Štatutárny zástupca príjemcu

prof. RNDr. Karol Mičieta, PhD.,
v zast. doc. RNDr. Milan Trizna, PhD., dekan
PriF UK

V Bratislava 27. 01. 2016

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu