

## Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

**APVV-0442-07****Aplikácia dynamických metód vo výskume materiálov**Zodpovedný riešiteľ **Doc. Ing. Roman Martoňák, DrSc.**

Príjemca

**Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK Bratislava****Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený**

1. Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK Bratislava
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

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

1. Steacie Institute for Molecular Sciences, National Research Council of Canada, Ottawa, Canada K1A 0R6
2. Physics Department, King's College London, Strand, London WC2R 2LS, United Kingdom
3. Deutsches GeoForschungsZentrum (GFZ), Section 3.3, Telegrafenberg, 14473 Potsdam, Germany

**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. 'High-pressure polymeric phases of carbon dioxide',  
Jian Sun, Dennis D. Klug, Roman Martoňák, Javier Antonio Montoya, Mal-Soon Lee, Sandro Scandolo and Erio Tosatti,  
Proc. Natl. Acad. Sci. USA 106, 6077 (2009)
2. 'Structural transformations in carbon under extreme pressure: Beyond diamond',  
Jian Sun, Dennis D. Klug and Roman Martoňák,  
J. Chem. Phys. 130, 194512 (2009)

3. 'Structural Prediction and Phase Transformation Mechanisms in Calcium at High Pressure', Yansun Yao, Dennis D. Klug, Jian Sun and Roman Martoňák, Phys. Rev. Lett. 103, 055503 (2009)
4. 'Stability of simple cubic calcium at high pressure: A first-principles study', Yansun Yao, Roman Martoňák, Serguei Patchkovskii and Dennis D. Klug Physical Review B 82, 094107 (2010)
5. 'Atomistic simulations of pressure-induced structural transformations in solids', R. Martoňák Eur. Phys. J. B 79, 241–252 (2011)

### **Uplatnenie výsledkov projektu**

V priebehu riešenia projektu sme získali rad originálnych a zaujímavých výsledkov v oblasti štruktúrnych fázových prechodov v materiáloch, ktoré sú v súčasnosti aktuálnym objektom výskumu. Tieto teoretické výsledky prispievajú k hlbšiemu pochopeniu vlastností týchto materiálov ako aj k interpretácii experimentálnych dát. Skúsenosti získané riešením tohoto projektu ako aj vybudovaná výpočtová infraštruktúra budú využité pri riešení nasledujúceho projektu APVV-0558-10, ktorý sa začal riešiť v r. 2011.

### **CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV**

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

Projekt bol zameraný na skúmanie štruktúrnych fázových prechodov v kryštalických materiáloch pri extrémnych podmienkach pomocou dynamických počítačových simulácií. Hlavnou použitou metódou bola ab initio molekulová dynamika (MD) a metadynamika. V tuhom CO<sub>2</sub> sme našli nové predpovede pre fázy, ktoré vznikajú kompresiou fáz II a III, pričom sme skúmali aj teplotnú závislosť transformácie. V prípade uhlíka sme skúmali post-diamantové fázy pri tlakoch rádu TPa, kde sa ukázalo, že pri kompresii sa diamantová fáza najprv zmení na jednoduchú kubickú a až pri dekompresii vzniká fáza BC8. Vo vápniku sme pri tlaku okolo 50 GPa predpovedali možnosť existencie novej fázy so štruktúrou I41/amd. Ďalej sme sa zamerali na otázku stability experimentálne pozorovanej jednoduchej kubickej štruktúry v Ca a ukázali sme, že anharmonické efekty prispievajú k jej stabilite pri izbovej teplote. V nitríde bóru (BN) sme podrobne preskúmali tlakom indukovanú transformáciu vrstevnatých fáz (sp<sup>2</sup>) na husté (sp<sup>3</sup>) fázy, pričom sme našli nový mechanizmus vedúci k vzniku novej metastabilnej fázy typu β-BeO s tetrahedrálnou koordináciou. Ukázali sme, že táto nová fáza by mohla byť pozorovateľná pri teplotách okolo 1000 K. V systéme Bi<sub>3</sub> sme skúmali tlakom indukovaný fázový prechod z molekulárnej fázy a zistili sme, že pri ňom dochádza k vzniku dimérov. Zaoberali sme sa tiež fázovými prechodmi v CdSe a MgSiO<sub>3</sub>. Vo všetkých prípadoch sme skúmali aj detailný mikroskopický mechanizmus pozorovaných transformácií. Rozvinuli sme tiež nový algoritmus na simuláciu konečných objektov pomocou MD pri konštantnom tlaku. V rámci projektu bol na FMFI UK vybudovaný výkonný paralelný počítačový cluster, ktorý bude využívaný aj v ďalších projektoch. Ciele projektu boli splnené.

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

The project was aimed at study of structural phase transitions in crystalline materials at extreme conditions employing dynamical computer simulations. The main approach applied was ab initio molecular dynamics (MD) and metadynamics. In crystalline CO<sub>2</sub> we found new predictions for phases created upon compression of phases II and III, and we investigated also the temperature dependence of the transformation. In carbon we studied post-diamond phases at TPa pressures and showed that upon compression the diamond phase first transforms to the simple cubic phase and only upon decompression the BC8 structure is

created. In calcium at pressures around 50 GPa we predicted the possible existence of a new structure I41/amd. We further focused on the problem of stability of the experimentally observed simple cubic (sc) structure in Ca and found that anharmonic effects contribute to its stability at room temperature. In boron nitride (BN) we studied in detail the pressure-induced transformation from layered (sp<sup>2</sup>) to dense (sp<sup>3</sup>) phases and found a new mechanism leading to formation of a new metastable tetrahedral phase with the  $\beta$ -BeO structure. We showed that this new phase should be observable at temperatures around 1000 K. In Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> we studied the pressure-induced transformation from the molecular phase and found that dimers are created in this process. We also studied phase transitions in CdSe and MgSiO<sub>3</sub>. In all cases we studied in detail the microscopic mechanism of the observed transformations. We also developed a new algorithm for constant-pressure MD simulation of finite objects. During the project we built at the Faculty of Mathematics, Physics and Informatics a powerful parallel computing cluster which will be employed for further projects. The project goals were fulfilled.

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

**Zodpovedný riešiteľ**

Doc. Ing. Roman Martoňák, DrSc.

V Bratislave 26.7.2011

**Štatutárny zástupca príjemcu**

Prof. RNDr. Jozef Masarik, DrSc.

V Bratislave 26.7.2011

.....  
podpis zodpovedného riešiteľa

.....  
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu