

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu APVV-0558-10
Štruktúrne a elektronické fázové prechody v kondenzovaných systémoch

Zodpovedný riešiteľ Doc. Ing. Roman Martoňák, DrSc.
Príjemca Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK Bratislava

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Katedra experimentálnej fyziky FMFI UK Bratislava
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Technische Universitaet Dresden, Institut fuer Physikalische Chemie, Dresden, Nemecko
2. Theoretische Physik, ETH Zurich, Švajčiarsko
3. International school for advanced studies (SISSA), Trieste, Taliansko

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. Daniele Selli, Igor A. Baburin, Roman Martoňák, and Stefano Leoni, *Superhard sp^3 carbon allotropes with odd and even ring topologies*, Phys. Rev. B **84**, 161411(R) (2011)
2. Liliana Hromadová, Roman Martoňák and Erio Tosatti, *Structure change, layer sliding, and metallization in high-pressure MoS_2* , Phys. Rev. B **87**, 144105 (2013)
3. Dušan Plašienka and Roman Martoňák, *Study of pressure-induced amorphization in sulfur using ab initio molecular dynamics*, Phys. Rev. B **85**, 094112 (2012).
4. M. Dian and R. Hlubina, *Spin-ice phase in a modified XY model*, Phys. Rev. B **84**, 224420 (2011)

5. T. Bzdušek and R. Hlubina, *What is the pairing glue in the cuprates? Insights from normal and anomalous propagators*, Philosophical Magazine, prijatý na publikovanie 2014.

Uplatnenie výsledkov projektu

Získané výsledky rozširujú poznatkovú bázu a v bezprostrednej budúcnosti možno očakávať ich uplatnenie v základnom výskume. Predpovede nových supertvrdých fáz uhlíka ako aj nových fáz germánia môžu byť zaujímavé aj z aplikačného hľadiska, ak sa nájde vhodný experimentálny protokol na ich prípravu.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

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

Pri riešení projektu bol získaný rad nových a zaujímavých výsledkov pre široké spektrum kondenzovaných systémov, v ktorých sa pozorujú štruktúrne a elektronické fázové prechody.

Za najzaujímavejšie výsledky získané v projekte považujeme nasledovné:

1. predpoveď viacerých nových metastabilných supertvrdých fáz uhlíka,
2. objasnenie mechanizmu tlakom indukovaného fázového prechodu v MoS_2 ,
3. preskúmanie vlastností amorfnej aj kvapalnej síry,
4. numerickú konštrukciu fázového diagramu nematického XY modelu na štvorcovej mriežke
5. identifikáciu anomálnej spektrálnej funkcie ako priameho nositeľa informácie o interakciách zodpovedných za supravodivosť

Celkový počet publikovaných a akceptovaných prác v rámci projektu k 29.9.2014 je 13, pričom všetky články boli publikované v karentovaných časopisoch. Tento počet je vyšší než pôvodne plánovaný (11). Z týchto 13 článkov 11 bolo publikovaných v časopisoch s impakt faktorom vyšším než 3.6 a všetky články boli zatiaľ citované 41-krát. V priebehu zvyšku roku 2014 a roku 2015 predpokladáme zaslanie a publikáciu niekoľkých ďalších článkov. Súčasťou projektu boli aj popularizačné aktivity vo forme prednášok na domácej letnej (Svit) aj zimnej (Košice) škole a jednej zahraničnej letnej škole (Bremen, Nemecko). V rámci projektu boli úspešne obhájené 4 PhD práce a 5 diplomových prác, pričom výsledky 3 diplomových prác boli už publikované v článkoch (J. Imriška, T. Bzdušek a M. Rifliková). Diplomové práce T. Bzduška a O. Kohuláka boli ocenené Cenou rektora UK. Výsledky projektu boli tiež prezentované na medzinárodných konferenciách, a to aj vo forme viacerých pozvaných prednášok. Na základe uvedených skutočností považujeme ciele projektu za splnené.

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

Within the project we found a series of new and interesting results for a broad spectrum of condensed matter systems exhibiting structural and electronic phase transitions. Among the most interesting results we mention the following:

1. prediction of several new metastable superhard phases of carbon,
2. revealing the mechanism of pressure induced structural transition in MoS_2 ,
3. investigation of properties of amorphous and liquid sulphur,
4. numerical construction of phase diagram of the nematic XY model on square lattice,
5. identification of the anomalous spectral function as direct carrier of information about interactions responsible for superconductivity

Total number of published and accepted papers within the project as of 29 September 2014 is 13 and all papers were published in journals listed in Current Contents. This number is higher than originally planned 11 papers. Eleven of the 13 papers were published in journals with impact factor higher than 3.6 and all papers have so far been cited 41 times. In course of 2014 and 2015 we expect to submit and publish few more papers. Part of the project was devoted also to popularisation activities such as lectures at domestic summer (Svit) and winter (Košice) schools and one summer school abroad

(Bremen, Germany). Within the project 4 PhD theses and 5 diploma theses were successfully defended and results of 3 diploma theses have already been published (J. Imříška, T. Bzdušek a M. Ríflíková). Diploma theses of T. Bzdušek and O. Kohulák were awarded the Prize of the Rector of the Comenius University. Results of the project were presented at international conferences including several invited lectures. Based on these facts we consider the project goals as 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 29.9.2014

Štatutárny zástupca príjemcu

Prof. RNDr. Jozef Masarik, DrSc.

V Bratislave 29.9.2014

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu