

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0496**

Nové fázy a fázové prechody v kondenzovaných látkach

Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Roman Martoňák, DrSc.**

Príjemca **Univerzita Komenského v Bratislave - Fakulta matematiky, fyziky a informatiky**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Katedra experimentálnej fyziky FMFI UK

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

SISSA Trieste (Taliansko)
University of Southampton (UK)
LENS Firenze (Taliansko)
ETH Zurich (Švajčiarsko)
University Gainesville (USA)
AV ČR Praha (ČR)

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

v rámci projektu nevznikli patenty

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

1. O. Kohulák and R. Martoňák: New high-pressure phases of MoSe₂ and MoTe₂, Physical Review B 95, 054105 (2017)
2. D. Plašienka, R. Martoňák and M. C. Newton: Ab initio molecular dynamics study of the structural and electronic transition in VO₂, Physical Review B 96, 054111 (2017)
3. L. Kopnický and R. Hlubina, Mean-field study of the Amperean pairing state, Phys. Rev. B 101, 024502 (2020).
4. F. Herman and R. Hlubina, Thermodynamic properties of Dynes superconductors, Phys. Rev. B 97, 014517 (2018).
5. P. Markoš and K. Muttalib: Phonon localization in surface-roughness dominated nanowires, Phys. Rev. B 99, 134208 (2019).

Uplatnenie výsledkov projektu

Všetky ciele projektu sa týkali základného výskumu a získané výsledky rozširujú poznatkovú bázu. Ich praktické uplatnenie je možné v dlhšom časovom horizonte.

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

Pri riešení projektu bol získaný rad nových a významných výsledkov. Za najzaujímavejšie považujeme nasledujúce:

1. predpoveď nových štruktúrnych fáz v MoSe₂ a MoTe₂
2. ab initio simulácia štruktúrneho prechodu vo VO₂
3. zistili sme, že ampérovský párovací stav nie je optimálnym stavom v modeloch s prúd-prúdovými interakciami
4. ukázali sme, že teória Dynesových supravodičov je termodynamicky konzistentná
5. numerický dôkaz lokalizácie akustických fonónov v nanodrôtoch s neusporiadaným povrchom
6. experimentálny aj teoretický dôkaz existencie dvoch amorfných fáz v SO₂

Celkový počet publikovaných prác v rámci projektu k 30.1.2020 je 17, pričom všetky články boli publikované v karentovaných časopisoch. Tento počet je vyšší než pôvodne plánovaný (15) a v priebehu roku 2020 predpokladáme zaslanie a publikáciu niekoľkých ďalších článkov. Všetky články boli zatiaľ citované 36-krát. Súčasťou projektu bol aj vzdelávací kurz vo forme prednášok na domácej letnej škole (Vitanová 2019). V rámci projektu boli úspešne obhájené 2 PhD práce (F. Herman a O. Kohulák) a 5 diplomových prác. Diplomové práce B. Rabatina, M. Ryníka a M. Badina 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 important results. Among the most interesting ones we mention the following:

1. prediction of new structural phases in MoSe₂ a MoTe₂
2. ab initio simulation of structural transition in VO₂
3. we have found that the Amperean pairing state is not an optimal state in models with current-current interactions
4. we have shown that the theory of Dynes superconductors is thermodynamically consistent
5. numerical evidence of the localization of acoustic phonons in surface-roughness dominated nanowires
6. experimental and theoretical evidence for existence of two amorphous phases in SO₂

Total number of published papers within the project as of 30 January 2020 is 17 and all papers were published in journals listed in Current Contents. This number is higher than originally planned 15 papers and in course of 2020 we expect to submit and publish few more papers. All papers have so far been cited 36 times. Within the project we gave a series of lectures at domestic summer school (Vitanová 2019). Within the project 2 PhD theses (F. Herman a O. Kohulák) and 5 diploma theses were successfully defended. Diploma theses of B. Rabatin, M. Ryník and M. Badin 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.