

Záverečná karta projektu

Názov projektu **2D-materiály a ich funkcionalizácia** Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0759**

Zodpovedný riešiteľ **Mgr. Ján Brndiar, PhD.**
Príjemca **Fyzikálny ústav SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Fyzikálny ústav Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, 84511 Bratislava, Slovensko.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

- 1) Institute for Theoretical Physics, University of Regensburg, 93040 Regensburg, Germany,
- 2) Department of Physics, North Carolina State University, Raleigh, North Carolina 27695-8202, USA,
- 3) Department of Applied Physics, Osaka University, Yamada-oka 2-1, Suita 565-0871, Japan,
- 4) Institute for Applied Physics, Justus-Liebig-Universität, 35392 Giessen, Germany,
- 5) Ústav informatiky Slovenskej akadémie vied, 845 07 Bratislava, Slovensko,
- 6) Fakulta prírodných vied, Univerzita sv. Cyrila and Metoda, 917 01 Trnava, Slovensko.

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

Žiadne, projekt základného výskumu.

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

- T. Frank, R. Derian, K. Tokár, L. Mitas, J. Fabian, and I. Štich, Many-Body Quantum Monte Carlo Study of 2D Materials: Cohesion and Band Gap in Single-Layer Phosphorene, Phys. Rev. X 9, 011018 (2019).
- Y. Adachi, H. F. Wen, Q. Zhang, M. Miyazaki, Y. Sugawara, H. Sang, J. Brndiar, L. Kantorovich, I. Štich, Y.J. Li, Tip-Induced Control of Charge and Molecular Bonding of Oxygen Atoms on the Rutile TiO₂ (110) Surface with Atomic Force Microscopy. ACS Nano 13, 6917-6924 (2019) (IF 2018: 13.709).
- Y. Naitoh, R. Turanský, J. Brndiar, Y.J. Li, I. Štich, and Y. Sugawara, Subatomic-scale force vector mapping above a Ge(001) dimer using bimodal atomic force microscopy, Nat. Phys. 13, 663 (2017).
- Q. Zhang, Y.J. Li, H. F. Wen, Y. Adachi, M. Miyazaki, Y. Sugawara, R. Xu, Z. H. Cheng, J. Brndiar, L. Kantorovich, and I. Štich, Measurement and Manipulation of the Charge State of an Adsorbed Oxygen Adatom on the

Rutile TiO₂(110)-1×1 Surface by nc-AFM and KPFM,
J. Am. Chem. Soc. 140, 15668 (2018).
- D. Dietzel, J. Brndiar, I. Štich, and A. Schirmeisen,
Limitations of Structural Superlubricity: Chemical Bonds versus Contact Size,
ACS Nano 11, 7642 (2017).

Uplatnenie výsledkov projektu

Jedná sa o projekt základného výskumu, a preto výsledky projektu prispievajú najmä k "databáze" poznatkov o 2D a im príbuzným materiálom. Za najväčší prínos projektu pokladáme vypracovanie konzistentných a veľmi presných metód kvantového Monte Carla (T. Frank, R. Derian, K. Tokár, L. Mitas, J. Fabian, and I. Štich, Phys. Rev. X 9, 011018 (2019)), ktoré umožňujú spočítať všetky dôležité parametre na interpretáciu experimentálnych výsledkov (quasiparticle gap, optical gap, exciton binding energy) resp. posúdiť presnosť zjednodušených modelov, včítane DFT a GW/BSE metód. Nami vyvinuté metódy dávajú veľmi potrebnú možnosť objektivizovať mnohé roztrúsené a často si odporujúce experimentálne výsledky. Tieto poznatky v súčasnosti používame pri štúdiu efektu deformácie (strainu) na elektrónové vlastnosti 2D materiálov ako jednej z viacerých možností funkcionalizácie 2D materiálov. Začíname tiež projekt ultra presných výpočtov interakčných energií a medzivrstvových vzdialeností 2D van der Waalsových multivrstiev a heterovrstiev. Ďalším krokom, odvíjajúcim sa od expertízy získanej v tomto projekte bude zakomponovanie efektu podložky (dielectric embedding) do efektívneho Hamiltoniánu. Tieto poznatky a metódy, ktoré sme vyvinuli výrazne posúvajú možnosti štúdia, poznania a porozumenia 2D materiálov a prispievajú k ich schopnosti prispieť k revolúcií v technike po revolúcií vo vede, ktorú už privodili.

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

Kľúčovým cieľom projektu bolo štúdium elektrónových a fonónových vlastností 2D materiálov použitím ultra presných mnoho-časticových stochastických metód kvantového Monte Carla. Hlavnou motiváciou bolo množstvo experimentálnych výsledkov pre zdanlivo rovnaký 2D materiál, ktoré sa netriviálne líšili. Príkladom sú napr. experimentálne šírky zakázaných pásov, ktoré vykazujú rozptyl v ráde 1 eV! Tento rozptyl sa čiastočne podarilo vysvetliť ako dôsledok experimentov prevádzaných na veľmi rozdielnych vzorkách, spôsobených použitím vzoriek na rôznych substrátoch, ktoré vytvárajú rôznu „dielektrický embedding“, rôznej citlivosti experimentálnych techník na prítomnosť defektov (napr. fotoluminiscencia a optická absorpcia), atď. Aj z tohto dôvodu predstavuje nová metóda konzistentného výpočtu všetkých dôležitých parametrov na interpretáciu experimentálnych výsledkov (quasiparticle gap, optical gap, exciton binding energy), ktorú sme vyvinuli (T. Frank, R. Derian, K. Tokár, L. Mitas, J. Fabian, and I. Štich, Phys. Rev. X 9, 011018 (2019)) dôležitý medzník v racionalizácii elektrónových vlastností 2D systémov a etalón ultra presných výpočtov na ideálnych systémoch bez defektov, prítomnosti dielektrík, atď. Projekt tiež predpokladal intenzívnu spoluprácu experimentom (Osaka University, Justus Liebig University Giessen) a jeho podporu. Túto časť projektu viedla tiež k viacerým experimentálne-teoretickým prácam na súvisiacich systémoch, ktoré boli publikované v časopisoch s najvyššími impakt faktormi, ako napr. Nat. Phys., ACS Nano, Nano Lett., J. Am. Chem. Soc. Kvalitu vedeckých výstupov projektu podčiarkuje aj akumulovaný impakt faktor 104.82 publikácií vytvorených v projekte.

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

The key objective of the project was study of electronic and vibrational properties of 2D materials using ultra accurate many-body stochastic Monte Carlo methods. The motivation for our effort was number of scattered experimental results for seemingly identical 2D systems which exhibited nontrivial differences. One single example being experimental band gaps which show differences of the order of 1 eV! This scatter was explained, in part, by differences in the experimental samples which were prepared on a variety of substrates which create different dielectric embedding, different experimental sensitivity to defects (e.g. photoluminescence and optical absorption), etc. This was one reason why the new method of computing of all key parameters for interpretation of experimental results (quasiparticle

gap, optical gap, exciton binding energy) which we have developed (T. Frank, R. Derian, K. Tokár, L. Mitas, J. Fabian, and I. Štich, Phys. Rev. X 9, 011018 (2019)) represents an important milestone in rationalization of electronic properties of 2D systems and etalon of ultra accurate modeling of ideal systems free of defects and dielectric embedding, etc. The project foresaw also intense experiment-theory collaboration (Osaka University, Justus Liebig University Giessen) and experimental backup. This part of project also led to several experimental-theory publications on related systems which appeared in journals with highest impact factors, such as Nat. Phys., ACS Nano, Nano Lett., J. Am. Chem. Soc. The quality of scientific results is corroborated also by cumulative impact factor of 104.82 of the project publications