



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-18-0168

Nové anorganické zlúčeniny s niklom, paládiom, meďou a striebrom: od DFT modelovania k syntéze pomocou iónových technológií

Zodpovedný riešiteľ **Ing. Pavol Noga, PhD.**

Príjemca

**Slovenská technická univerzita v Bratislave -
Materiálovotechnologická fakulta, Trnava**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Slovenská technická univerzita v Bratislave
Materiálovotechnologická fakulta so sídlom v Trnave
Ústav výskumu progresívnych technológií

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

Center for new technologies, University of Warsaw, Poľsko
Poľska akadémia vied, Krakov, Poľsko
Laboratory for atomic physics, Institute of Nuclear Sciences Vinča, Srbsko
University of Jyväskylä, Fínsko

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

žiadne

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

1. M. Derzsi, K. Tokár, P. Piekarczyk, W. Grochala, Charge ordering mechanism in silver difluoride, *Physical Review B* 105 (2022) L081113. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.L081113>
2. M. Derzsi, M. Uhliar, K. Tokár, Ag₆Cl₄: The first silver chloride with rare Ag₆ clusters from an ab initio study, *Chemical Communications* 57 (79) (2022) 10186 – 10189. DOI: <https://doi.org/10.1039/d1cc03426j>
3. K. Tokár, M. Derzsi, W. Grochala, Comparative computational study of antiferromagnetic and mixed-valent diamagnetic phase of AgF₂: Crystal, electronic and phonon structure and p-T phase diagram, *COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE* 188, 110250 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110250>
4. W. Wegner, K. Tokár, J. Lorenzana, M. Derzsi and W. Grochala, Gigantic work function in layered AgF₂, *Physical Chemistry Chemical Physics* 22 (2020) 21809 – 21815. DOI: <https://doi.org/10.1039/d0cp03706k>
5. D. Fabušová, K. Tokár, M. Derzsi, P. Piekarczyk, P. T. Jochym, Phase stability of PdO₂: The role of temperature and electron correlations, rozpracovaný manuskript, bude publikovaný v 2023

6. Michaela Gašpárková, Kamil Tokár, Mariana Derzsi, Radovan Bujdák, Diana Fabušová, Crystal and electronic structure of thermodynamically stable nickel sesquioxide Ni₂O₃ from ab initio, rozpracovaný manuskript, bude publikovaný v 2023

Uplatnenie výsledkov projektu

Projekt prispel k poznaniu nových, doposiaľ nepoznaných štruktúr halidov a oxidov prechodných kovov Ag, Cu, Ni, Pd, z ktorých niektoré vykazujú potenciál supravodivosti, či vysokej katalytickej aktivity. Výsledky projektu budú využité pri ďalšom skúmaní halidov a oxidov týchto kovov, vyhodnotení ich úžitkových vlastností (elektrické, mechanické, optické) a ciest k ich syntéze. Tieto materiály sú potenciálne využiteľné v chemickom, farmaceutickom a energetickom priemysle ako katalyzátory, niektoré majú potenciál využitia vo fotovoltaických paneloch pre výrobu supravodivých káblov.

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

Výskum sa v rámci projektu zameriaval na predpovedanie kryštálových štruktúr nových binárnych zlúčenín Ni, Pd, Cu a Ag s kyslíkom a halogénmi. Použili sa evolučné algoritmy a kvantovo-mechanické výpočty. Bolo predpovedaných viac ako 40 nových fáz. V Ag-Cl systéme sme objavili nové subchloridy s unikátnymi vlastnosťami, ktoré majú vysoký technologický potenciál. Ukázalo sa, že PdO₂ vykazuje zaujímavé spinové prechody a možnú stabilizáciu vysokého spinu a Ni₂O₃ neobvyklú magnetickú stabilitu. Výsledky otvárajú nové cesty pre syntézu materiálov s rôznymi vlastnosťami. Stanovené ciele v oblasti teoretickej časti projektu boli naplnené vysoko nad pôvodné očakávania, v experimentálnej oblasti boli aktivity výrazne brzdené výkyvmi cien materiálov na svetových trhoch, pandémiou COVID-19, čipovou krízou a vojnou na Ukrajine. Napriek tomu sa podarilo získať cenné výsledky a poznatky, ktoré budú využité pre syntézu predpovedaných fáz.

V rámci projektu bolo publikovaných 16 publikácií v zahraničných karentovaných časopisoch, ďalšia jedna je v recenznom konaní a dve budú odoslané na recenziu v najbližších týždňoch. Oproti pôvodnému plánu, 8 publikácií tejto kategórie, projekt vyprodukoval dvojnásobok. Celkovo boli tieto publikácie citované zatiaľ 29 krát (bez autocitácií).

Počas trvania projektu sa formálneho a neformálneho vzdelávania zúčastnilo dokopy 16 účastníkov, boli vypracované a obhájené 4 diplomové práce, riešené 2 doktorandské témy, zrealizovali sa 2 vzdelávacie kurzy a 28 popularizačných aktivít, podané nadväzujúce 4 projekty a vytvorené 2 nové pracovné miesta. Tieto aktivity výrazne presahujú plánované počty, niektoré neboli pôvodne plánované vôbec.

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

The research within the project focused on predicting the crystal structures of new binary compounds of Ni, Pd, Cu, and Ag with oxygen and halogens. Evolutionary algorithms and quantum-mechanical calculations were used. More than 40 new phases were predicted. In the Ag-Cl system, new subchlorides with unique properties were discovered, showing high technological potential. It was found that PdO₂ exhibits interesting spin transitions and possible stabilization of high spin states, while Ni₂O₃ displayed unusual magnetic stability. These results open new pathways for synthesizing materials with diverse properties. The set goals in the theoretical part of the project were exceeded far beyond the original expectations. However, activities in the experimental area were significantly hindered by fluctuations in material prices on world markets, the COVID-19 pandemic, chip crisis, and the war in Ukraine. Despite these challenges, valuable results and insights were obtained, which will be used for synthesizing the predicted phases.

Within the project, 16 publications were published in international peer-reviewed journals, with one more currently under review, and two more scheduled for submission in the coming weeks. Compared to the original plan of 8 publications in this category, the project has produced twice as many. Overall, these publications have been cited 29 times so far (excluding self-citations).

During the duration of the project, a total of 16 participants took part in formal and informal education activities, 4 Master theses were elaborated and defended, 2 doctoral topics were

addressed, 2 educational courses and 28 popularization activities were carried out. Furthermore, 4 follow-up projects were submitted for evaluation, and 2 new job positions were created. These activities significantly exceeded the planned numbers, with some not anticipated originally.