



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-19-0371

Využitie metód strojového učenia vo fyzike kondenzovaných látok

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)

LENS Firenze (Taliansko)

Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research, Shanghai (Čína)

University of South Florida (USA)

University Cardiff (UK)

Uni Goettingen, Nemecko

Univerzita Zurich (Švajčiarsko)

TU Delft (Holandsko)

FzÚ AVČR Praha (Česko)

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

A1 Matej Badin and Roman Martoňák, Nucleating a Different Coordination in a Crystal under Pressure: A Study of the B1-B2 Transition in NaCl by Metadynamics, Phys. Rev. Lett. 127, 105701 (2021)

A2 Jinwei Yan, Ondrej Tóth, Wan Xu, Xiao-Di Liu, Eugene Gregoryanz, Philip Dalladay-Simpson, Zeming Qi, Shiyu Xie, Federico Gorelli, Roman Martoňák, and Mario Santoro, High-Pressure Structural Evolution of Disordered Polymeric CS₂, J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 7229–7235

B1 D. Kavický, F. Herman, R. Hlubina, Model-independent determination of the gap function of nearly localized superconductors, Phys. Rev. B 105, 214504 (2022)

B2 A. Škrlec, R. Hlubina, Eliashberg-like theory for Dynes superconductors, Phys. Rev. B 109, 014507 (2024)

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)

Za najzaujímavejšie výsledky považujeme nasledujúce:

A1 Priama demonštrácia homogénnej nukleácie v štruktúrnom fázovom prechode kryštál-kryštál pomocou dynamickej simulácie a zároveň ukážka použiteľnosti koordinačného čísla ako jednoduchej a generickej kolektívnej premennej pre simuláciu tlakom indukovaných (aj iných) štruktúrnych prechodov pomocou metadynamiky. Výsledok otvára cestu k predpovediam výsledkov štruktúrnych fázových prechodov.

A2 Preskúmanie evolúcie štruktúry pri tlakom indukovanej polymerizácii molekulárnej fázy CS₂.

B1 Návrh novej metódy, ktorá umožňuje z meraní tunelovej hustoty stavov priamo extrahovať komplexnú funkciu energetickej medzery $\Delta(\omega)$ v silno neusporiadaných supravodičoch v blízkosti prechodu kov-izolant.

B2 Vypracovanie modifikovanej Eliašbergovej teórie pre supravodiče, ktorá zohľadňuje dynesovské správanie v dôsledku narušania párov elastickými rozptylmi elektrónov.

Celkový počet publikácií v karentovaných časopisoch (vrátane špičkových) v rámci projektu k 18.7.2024 je 13. V priebehu r. 2024 predpokladáme zaslanie a publikáciu niekoľkých ďalších článkov. Všetky články boli zatiaľ citované 87 krát. Súčasťou projektu bola aj organizácia série Letných škôl fyziky kondenzovaných látok v Liptovskom Jáne v r. 2022, 2023 a 2024. V rámci projektu bolo úspešne obhájených 5 PhD prác a 5 diplomových prác (2 diplomové práce získali Cenu rektora UK). Výsledky projektu boli prezentované na medzinárodných konferenciách (vrátane niekoľkých pozvaných prednášok).

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

Among the most interesting results we mention the following:

A1 Direct demonstration of homogeneous nucleation in a structural phase transition crystal-crystal via dynamical simulations as well as demonstration of the applicability of the coordination number as a simple generic collective variable for simulation of pressure-induced (and other) structural transitions by metadynamics. The result opens way to prediction of outcomes of structural phase transitions.

A2 Study of structural evolution in pressure-induced polymerization of molecular CS₂.

B1 Proposal of a new method for extraction, from the measured tunneling density of states, of the complex gap function $\Delta(\omega)$ in strongly disordered superconductors in the vicinity of the metal-insulator transition.

B2 Elaboration of a modified Eliashberg theory of superconductors which takes into account the Dynes phenomenology caused by elastic pair-breaking scattering of the electrons.

Total number of papers published within the project in journals listed in Current Contents (including high-profile journals) as of 18 July 2024 is 13. In course of 2024 we expect to submit and publish few more papers. All these papers have been so far cited 87 times. Part of the project was also the organization of a series of Summer school of Condensed Matter Physics (Liptovský Ján 2022, 2023 and 2024). Within the project 5 PhD theses and 5 diploma theses were successfully defended (2 diploma theses were awarded the Prize of the Rector of the Comenius University). Results of the project were presented at international conferences including several invited lectures.