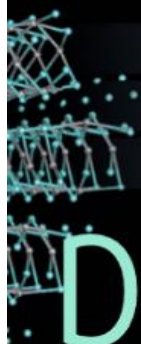


2022 – Výskumná skupina počítačového modelovania materiálov na ATRI MTF STU v Trnave

VÝSKUMNÁ SKUPINA POČÍTAČOVÉHO MODELOVANIA MATERIÁLOV na ATRI MTF STU v TRNAVE



PREDIKCIA NOVÝCH ANORGANICKÝCH ZLÚČENÍN

Dnešný výskum v oblasti materiálov, či už anorganických, organických alebo biologických, sa zameriava na čoraz komplexnejšie a exotické materiály. Chemici dokážu syntetizovať zlúčeniny s takmer akoukoľvek stechiometriou a štruktúrnou zložitou a materiáloví vedci im vedia dať požadovanú formu a veľkosť. Napriek tomu zostáva nepreskúmaná oblasť jednoduchých chemických zlúčenín, ktoré čakajú na svoje objavenie. V mnohých prípadoch sa tento problém týka bežných chemických väzieb a reakcií a s nimi súvisiacich značne nezmappovaných miest na fázových diagramoch už známych a extrémne dôležitých chemických spojení. Príkladom sú početné chýbajúce zlúčeniny prechodných prvkov s kyslíkom a halogénovými prvkami. Medzi nimi sa nachádzajú až zarážajúco jednoduché binárne oxidy a halidy niklu, paládia, medi a striebra, ktoré sú obzvlášť významné a vyžadujú si našu pozornosť. Zatiaľ čo početné fázy a bohatý polymorfizmus sú pozorované pre oxidy a halidy skorých prechodných prvkov, oxidy neskorých prechodných prvkov predstavujú oveľa menej prebádané územie. Toto územie vytvára pôdu pre výskumný program výskumnej skupiny **Počítačového modelovania materiálov**.

Skupina Počítačového modelovania materiálov vznikla pomerne nedávno v roku 2018 na Ústave výskumu progresívnych technológií Materiálovotechnologickej fakulty STU v Trnave. Jej zakladateľkou je dr. hab. Mariana Derzsi a spolu

s Dr. Kamilom Tokárom vedú mladý tím pozostávajúci zo študentov I. až III. stupňa (bakalárov, inžinierov a doktorandov) a postdokov.

V rámci svojej výskumnej činnosti sa zameriavame na problémy z fyziky tuhých látok a kryštálovej chémie. Primárne sa naša skupina špecializuje na **počítačové modelovanie anorganických kryštallických zlúčenín na atomárnej škále** pomocou kvantovo-mechanických metód založených na teórii hustotového funkcionálu (DFT, z angl. Density Functional Theory) a evolučných algoritmov. Cieľom nášho výskumu je predpovedať nové anorganické zlúčeniny so zaujímavými vlastnosťami a odhaliť ich potenciál ako nových funkčných materiálov. Na ceste k novým funkčným materiálom predstavujú prechodné kovy vysoko atraktívne základné stavebné kamene vďaka otvorenej d šupke (valenčnej sfére), ktorá ponúka bohaté možnosti hry s elektrónovými stupňami voľnosti