Názov výsledku: Superpočítačové modelovanie 2D materiálov ultra presnými metódami kvantového Monte Carla

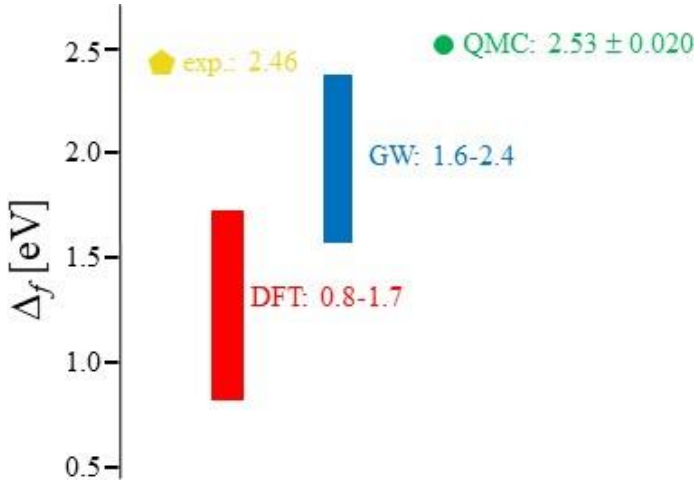
Anglicky názov výsledku: Supercomputer modeling of 2D materials using ultra-accurate quantum Monte Carlo methods

Autori: Ivan Štich

Typ a číslo projektu: APVV-21 0272, VEGA 2/0133/25, VEGA 2/0131/23

Anotácia výsledku:

Výsledok zahŕňa viacročné výsledky superpočítačového modelovania elektrónovej štruktúry 2D materiálov ultra presnými stochastickými metódami kvantového Monte Carla (QMC). Výsledkom je prehľadový článok vo vysoko impaktovanom časopise *Applied Physics Reviews* (IF 2024: 11.6). Do konzorcia autorov som bol pozvaný na základe viacerých predošlých výsledkov, ktoré som publikoval na tému QMC modelovania 2D materiálov (Phys. Rev. X **9**, 011018 (2019), Phys. Rev. Research, **5**, 033223 (2023). Phys. Rev. Research **6**, 013007 (2024)…). Prehľadový článok podáva informáciu o metóde QMC, jej presnosti a o jej výsledkoch pre 2D materiály. Môj príspevok sa týkal najmä elektronických excitácii v monovrstvách fosforénu a MoS_2 a ich modulácií mechanickými deformáciami. Na získanie týchto výsledkov bolo treba desiatky miliónov core hodín, ktoré sme získali úspešnými projektami Tier-0 PRACE a EuroHPC, viď vyššie. Tento článok je prvý a zatiaľ jediný prehľadový článok o aplikácií QMC metód na 2D materiály a predpokladám, že ako referenčný materiál na danú tému bude aj často citovaný.



Obr. 1. Porovnanie šírky zakázaného pásu v monovrstve fosforénu určeného experimentom a spočítaný QMC metódou a inými bežne používanými metódami (DFT a GW).

Hlavné scientometrické výstupy:

[1] D. Wines, J. Ahn, Y. Kwon, L. Mitas, A. Benali, P. R.C. Kent, F. A. Reboredo, J. T. Krogel, B. Rubenstein, K. Saritas, H. Shin, **I. Štich**, and Can Ataca, *Toward improved property prediction of 2D materials using many-body quantum Monte Carlo methods*, Appl. Phys. Rev. **12**, 031317 (2025); doi: 10.1063/5.0220257, **IF 2024: 11.6**