

## Simulácie štruktúrálnych fázových prechodov v kryštáloch

Roman Martoňák

[martonak@fmph.uniba.sk](mailto:martonak@fmph.uniba.sk)

V prednáške bude prezentovaný algoritmus pre simuláciu štruktúrálnych fázových prechodov v kryštáloch založený na metadynamike, ktorý umožňuje simuláciu komplexných transformácií vrátane rekonštruktívnych fázových prechodov prvého druhu. Budú tiež ukázané aplikácie techniky v kombinácii s ab initio výpočtami na simuláciu viacerých dôležitých systémov. Zameriame sa najmä na skúmanie tlakom indukovaných fázových prechodov v rôznych fázach SiO<sub>2</sub>, polymerizáciu molekulárnych kryštálov CO<sub>2</sub>, prípravu post-diamantových fáz uhlíka ako aj predpoveď novej fázy vápnika pri vysokom tlaku.