

# Najvýznamnejšie výsledky vedeckej práce za rok 2020

## Základný výskum

### Štúdium kvantových efektov v supravodičoch pomocou STM pri veľmi nízkych teplotách

**Projekty:** APVV-18-0358, VEGA 2/0058/20, VEGA 1/0743/19, EMP-H2020 Project No. 824109, the COST action CA16218 (NanocoHybri)

**Riešitelia:** P. Samuely, P. Szabó, J. Kačmarčík, M. Kopčík, O. Šofranko, O. Onufriienko

Pomocou nízkoteplotného rastrovacieho mikroskopu STM a ďalších meraní pri veľmi nízkych teplotách a vysokých magnetických poliach sme ukázali, že:

1. kvantový fázový prechod supravodič-izolant v extrémne neusporiadanom ultratenkom filme MoC pod vplyvom magnetického poľa prebieha tzv. fermiónovou cestou a je riadený Zeemanovými spinovými efektami napriek transverzálnej orientácii magnetického poľa [1];
2. feromagnetické klastre vodíka na povrchu supravodivého bórom dopovaného diamantu spôsobujú vznik Yu-Shiba-Rusinovových pásov vo vnútri supravodivej energetickej medzery [2];
3. misfitové silne anizotropné supravodiče  $(\text{LaSe})_{1.14}(\text{NbSe}_2)_2$  predstavujú platformu pre extrémne elektrónové dopovanie dichalkogenidov prechodových kovov. Hoci ide o masívne kryštály, ich elektrónová štruktúra je identická s monovrstvou  $\text{NbSe}_2$ , iba posunutá o 0,3 eV. Systém vykazuje tzv. Isingovu supravodivosť s kritickým magnetickým poľom desaťnásobne vyšším ako je Pauliho limita a lokálne vlny nábojovej hustoty [3, 4].

[1] M. Žemlička, M. Kopčík, P. Szabó, T. Samuely, J. Kačmarčík, P. Neilinger, M. Grajcar, P. Samuely: *Zeeman-driven superconductor-insulator transition in strongly disordered MoC films: Scanning tunneling microscopy and transport studies in a transverse magnetic field.*

**Physical Review B 102 (2020) 180508(R), IF=5,1, Nature Index**

[2] G. Zhang, T. Samuely, N. Iwahara, J. Kačmarčík, Ch. Wang, P.W. May, J.K. Jochum, O. Onufriienko, P. Szabó, Sh. Zhou, P. Samuely, V.V. Moshchalkov, L.F. Chibotaru, H.G. Rubahn: *Yu-Shiba-Rusinov bands in ferromagnetic superconducting diamond.*

**Science Advances 6 (2020) eaaz2536, IF=13,116, Nature Index**

[3] R. T. Leriche, A. Palacio-Morales, M. Campetella, C. Tresca, S. Sasaki, Ch. Brun, F. Debontridder, P. David, I. Arfaoui, O. Šofranko, T. Samuely, G. Kremer, C. Monney, T. Jaouen, L. Cario, M. Calandra, T. Cren: *Misfit Layer Compounds: A Platform for Heavily Doped 2D Transition Metal Dichalcogenides.*

**Advanced Functional Materials 2020, 2007706, IF = 16,836, Nature Index**

[4] O. Šofranko, R. Leriche, A.P. Morales, T. Cren, S. Sasaki, L. Cario, P. Szabo, P. Samuely, T. Samuely: *Periodic Surface Modulation of  $(\text{LaSe})_{1.14}(\text{NbSe}_2)$  Observed by Scanning Tunneling Microscopy.* **Acta Physica Polonica A 137 (2020) 785, IF=0,590**

## Štúdium fundamentálnych vlastností frustrovaných magnetických systémov

**Projekty:** VEGA 2/0058/19, APVV-17-0020

**Riešitelia:** E. Jurčišinová, M. Jurčišin

Exaktným riešením antiferomagnetického Isingovho modelu za prítomnosti tiež antiferomagnetickkej interakcie medzi druhými susedmi na rekurzívnej priestorovo centrovanej kubickej mriežke bola prvýkrát teoreticky predpovedaná existencia intermediálnej fázy s vlastnosťami spinovej kvapaliny v takomto magnetickom systéme, ktorá oddeľuje dve antiferomagnetické fázy (Néelovú a kolineárnu). Bolo ukázané, že všetky fázové prechody v takomto systéme sú fázovými prechodmi druhého druhu. Bola tiež ukázaná existencia unikátneho, vysoko makroskopicky degenerovaného základného stavu, existencia ktorého vedie k anomálnemu (Schottkyho) správaniu sa mernej tepelnej kapacity v jeho blízkosti pri nízkych teplotách. Okrem toho, samotná existencia intermediálnej fázy vedie k prítomnosti troch za sebou idúcich fázových prechodov druhého druhu v teplotnej závislosti [1]. V rámci exaktne riešiteľného antiferomagnetického Isingovho modelu na rekurzívnej oktahedronovej mriežke bol identifikovaný potenciálny zdroj experimentálne meraného slabého feromagnetizmu a prítomnosti poľom indukovaných metamagnetických fázových prechodov v čistých antiferomagnetických systémoch so základnou oktahedronovou štruktúrou [2]. Systematickou analýzou 1- až 7-uzlovej klastrovej efektívno-poľovej aproximácie bola študovaná možnosť použitia efektívnej poľovej teórie na vyšetovanie a analýzu termodynamických vlastností geometricky frustrovaných magnetických materiálov s pyrochlórovou štruktúrou vo vonkajšom magnetickom poli [3]. Okrem toho, boli odvodené všeobecné rovnice, ktoré v rámci aproximácie efektívnej teórie poľa riadia polohu kritických teplôt a hodnoty kritických koncentrácií zriedených magnetických systémov s ľubovoľným koordinačným číslom [4].

[1] E. Jurčišinová and M. Jurčišin: *Prediction of the existence of a spin-liquid-like phase in the antiferromagnetic  $J_1$ - $J_2$  spin-1/2 system on the body-centered cubic lattice.*

**Physical Review B 101 (2020) 21443, IF = 3.575**

[2] E. Jurčišinová and M. Jurčišin: *Evidence for weak ferromagnetism and metamagnetic phase transitions in frustrated antiferromagnetic systems with octahedral structure.*

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials 513 (2020) 167085, IF = 2.717**

[3] E. Jurčišinová and M. Jurčišin: *Ground states, residual entropies, and specific heat capacity properties of frustrated Ising system on pyrochlore lattice in effective field theory cluster approximations.*

**Physica A 554 (2020) 124671, IF = 2.924**

[4] E. Jurčišinová and M. Jurčišin: *Critical temperatures and critical concentrations in diluted magnetic systems: General solution of the Ising model in effective-field theory approach.*

**Physica A 540 (2020) 123160, IF = 2.924**

## **Metódy analýzy obrazu pri kvantifikácii neurónov a štúdiu dynamických vlastností elastických štruktúr**

**Projekty:** APVV 15-0665, MAD: SK-HU

**Riešitelia:** Z. Tomori, J. Kubacková

V prípade rozsiahlej štúdie zahraničného partnera (University of California, San Diego) bola viacerými metódami dokazovaná hypotéza, že cieleň transport liečiv do tzv. subpiálnej vrstvy CNS zabráni šíreniu neuro-degeneratívnych zmien v prípade choroby ALS (Amyrofickej laterálnej sklerózy). Vyvinuli sme softvér umožňujúci kvantifikáciu axónov sciatického nervu a to v automatickom aj interaktívnom režime. To pomohlo dokázať výrazný terapeutický efekt s možným klinickým využitím a publikovať prácu v prestížnom časopise.

V rámci spoločného MAD grantu s Biofyzikálnym ústavom MAV v Szegede sme skúmali elastické vlastnosti polymerizovaných mikroštruktúr. Pomocou vysokorýchlostnej kamery zaznamenávame relaxáciu mikropružinky periodicky naťahovanej a uvoľňovanej pomocou laserovej optickej pasce a následnou analýzou videozáznamu je možné určiť viskozitu okolitého prostredia. Na našom pracovisku bol realizovaný softvér, výroba pružných elementov a spomínaný experiment.

[1] M. Bravo-Hernandez, T. Tadokoro, M. Navarro, O. Platoshyn, Y. Kobayashi, S. Marsala, A. Miyano-hara, S. Juhas, J. Juhasova, **Z. Tomori**, I. Vanicky, P. Chen, N. Govea-Perez, D. Ditsworth, J. Ciacci, S. Gao, W. Zhu, E. Ahrens, S. Driscoll, T. Glenn, M. McAlonis-Downes, S. Da Cruz, S. Pfaff, B. Kaspar, D. Cleveland, H. Kupcova-Skalknikova, H. Studenovska, V. Proks, M. Marsala: *Spinal subpial delivery of AAV9 enables widespread gene silencing and blocks motor neuron degeneration in ALS*, **Nature Medicine 26 (2020) 118, IF = 30.64, Nature Index**

[2] **J. Kubacková**, G.T. Iványi, **V. Kažiková**, A. Strejčková, A. Hovan, G. Žoldák, G. Vizsnyiczai, L. Kelemen, **Z. Tomori**, and G. Bánó: *Bending dynamics of viscoelastic photopolymer nanowires*, **Applied Physics Letters 117 (2020) 013701, IF = 3,59, Nature Index**

## O ovládateľnosti magnetických kvapalín elektrickými silami a príčinách nižšej elektrickej pevnosti

**Projekty:** VEGA 2/0011/20, APVV-18-0160

**Riešitelia:** M. Rajňák, K. Paulovičová, M. Karpets, M. Timko, P. Kopčanský

Magnetické kvapaliny (MK) pozostávajúce z magnetických nanočastíc (MNČ) a transformátorového oleja (TO) predstavujú atraktívny materiál pre elektrotechniku. Osobitou elektro-izolačnou vlastnosťou MK je zlepšená elektrická pevnosť v porovnaní s TO. Toto vylepšenie však nie je samozrejmosťou a o opačnom vplyve MNČ na izolačné vlastnosti TO sa publikovalo málo. V našej štúdií sme podrobili vybrané MK s  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  MNČ testovaniu elektrickej pevnosti pri rôznych teplotách. Štatistická analýza poukázala na nižšiu elektrickú pevnosť TO v dôsledku prítomnosti MNČ. Za možnú príčinu tohto efektu považujeme efektívne modifikovaný povrch MNČ a ich limitovanú schopnosť zachytávať priestorový náboj [1].

Na zvýšenie chladiacej účinnosti MK sa často využívajú MNČ na báze MnZn feritu. Na tomto systéme sme dokázali, že dielektrické spektrum MK je možné ladiť aplikovaním DC bias napätia. Tento jav dopĺňa spôsoby ovládania fyzikálnych vlastností MK externými silami a ponúka ďalšie aplikačné možnosti MK [2].

[1] **M. Rajňák**, J. Kurimský, R. Cimbala, Z. Čonka, P. Bartko, M. Šuga, **K. Paulovičová**, J. Tóthová, **M. Karpets**, **P. Kopčanský**, **M. Timko**: *Statistical analysis of AC dielectric breakdown in transformer oil-based magnetic nanofluids*.

**Journal of Molecular Liquids** 309 (2020) 113243, IF = 5.065

[2] **M. Rajnak**, B. Dolnik, J. Krempasky, R. Cimbala, K. Parekh, R. Upadhyay, **K. Paulovicova**, **P. Kopcansky**, **M. Timko**: *Controllability of ferrofluids' dielectric spectrum by means of external electric forces*.

**Journal of Physics D: Applied Physics** 54 (2021) 035303, IF = 3.169

## Štúdium mechanizmov amyloidnej agregácie proteínov a dizajn inhibítorov

**Projekt:** VEGA 2/0145/17, MVTS COST 083/14 action BM1405, APVV-18-0284, MAD: CNR-SAS

**Riešitelia:** A. Antošová, Z. Bednáriková, D. Fedunová, M. Gančár, Z. Gažová, J. Marek

Veľkým problémom pri skúmaní mechanizmov tvorby amyloidných štruktúr a hľadani inhibítorov *in vitro* je reprodukovateľnosť výsledkov. Malé zmeny v protokoloch majú za následok výrazné rozdiely vo vlastnostiach a morfológii amyloidných štruktúr. V snahe vyriešiť tento problém sme v rámci spolupráce v COST konzorciu vytvorili súbor minimálnych informácií potrebných pre reprodukovateľnosť agregáčnych experimentov (MIRAGGE). Táto príručka má nielen pomôcť výskumným pracovníkom reprodukovať publikované výsledky, ale aj uľahčiť systematické ukladanie údajov do databáz a navrhovanie nových štúdií. Naše rozsiahle skúsenosti so štúdiom rôznej morfológie amyloidných fibríl pomocou atómovej silovej mikroskopie sme spracovali do návodu ako pripraviť rôzne typy vzoriek na základe ich vlastností a používať najbežnejšie zobrazovacie módy skenovania. Počiatočné zmeny konformácie proteínov, ktoré predchádzajú tvorbe amyloidných fibríl proteínov sú v súčasnosti neobjasnené. Naše výsledky poskytli štruktúrne dôkazy o počiatočných krokoch rozbaľovania inzulínu, ktoré spúšťajú jeho agregáciu. Zároveň sme pripravili netoxický a stabilný cyklický peptid, obsahujúci aminokyselinový motív PWWP, ktorý viedol k úplnej inhibícii fibrilizácie inzulínu. Keďže amyloidné ochorenia nie sú liečiteľné, našou hlavnou motiváciou je hľadanie účinných inhibítorov amyloidnej agregácie. Skúmali sme účinky štyroch zlúčenín prirodzene sa vyskytujúcich v listoch zeleného čaju a ich ekvimolárnych zmesí ako inhibítorov fibrilizácie inzulínu, pričom iba ((-)-epigalokatechín galát bol účinnou zložkou. Zamerali sme aj na zlepšenie inhibičných vlastností študovaných inhibítorov ich heterodimerizáciou. Inhibičný potenciál heterodimérov 7-metoxytakrínu a 2-aminobenzotiazolu spojených alifatickým linkerom sa výrazne zvyšoval v závislosti od dĺžky linkera. V ďalších prácach sme zistili, že kovové nanočastice (magnetit, zlato, striebro) s rôznou povrchovou modifikáciou (rôzne modifikovaný dextrans, chitosan, kyselina citrónová) boli schopné inhibovať tvorbu amyloidných agregátov lyzozýmu,  $\alpha$ - a  $\beta$ -laktoglobulínu. Navyše, zlaté nanočastice nielen deštruovali fibrily lyzozýmu v závislosti od ich koncentrácie, ale znížili aj ich toxický účinok na neuroblastómové bunky.

[1] P.M. Martins, S. Navarro, A. Silva, M.F. Pinto, Z. Sárkány, F. Figueiredo, P.J.B. Pereira, F. Pinheiro, **Z. Bednarikova**, M. Burdukiewicz, O.V. Galzitskaya, **Z. Gazova**, C.M. Gomes, A. Pastore, L.C. Serpell, R. Skrabana, V. Smirnovas, M. Ziaunys, D.E. Otzen, S. Ventura, S. Macedo-Ribeiro: *MIRAGGE – Minimum Information Required for Reproducible AGGregation Experiments*.

**Frontiers in Molecular Neuroscience 13 (2020) 222, IF 4.057**

[2] C.Y. Lin, T.H. Wang, S.C. How, **Z. Bednarikova**, D. Fedunova, **Z. Gazova**, J.W. Wu, S.S. Wang: *Investigating the effect of sugar-terminated nanoparticles on amyloid fibrillogenesis of  $\beta$ -lactoglobulin.*

**International Journal of Biological Macromolecules 165 (2020) 291, IF = 4.94**

[3] **Z. Bednarikova**, **Z. Gazova**, F. Valle, E. Bystrenova: *Atomic force microscopy as an imaging tool to study the bio/nonbio complexes.*

**Journal of Microscopy 280 (2020) 241, IF = 1.575**

[4] **M. Gancar**, E. Kurin, **Z. Bednarikova**, **J. Marek**, P. Mucaji, M. Nagy, **Z. Gazova**: *Amyloid Aggregation of Insulin: An Interaction Study of Green Tea Constituents.*

**Scientific Reports 10 (2020) 9115, IF = 3.998**

[5] I. Khmara, M. Molcan, **A. Antosova**, **Z. Bednarikova**, V. Zavisova, M. Kubovcikova, A. Jurikova, V. Girman, E. Baranovicova, M. Koneracka, **Z. Gazova**: *Bioactive properties of chitosan stabilized magnetic nanoparticles – Focus on hyperthermic and anti-amyloid activities.*

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials 513 (2020) 167056, IF = 2.717**

[6] L. Jin, W. Gao, C. Liu, N. Zhang, S. Mukherjee, R. Zhang, H. Dong, A. Bhunia, **Z. Bednarikova**, **Z. Gazova**, M. Liu, J. Han, H.C. Siebert: *Investigating the inhibitory effects of entacapone on amyloid fibril formation of human lysozyme.*

**International Journal of Biological Macromolecules 161 (2020) 1393, IF = 4.940**

[7] R. Pariary, B. Ghosh, **Z. Bednarikova**, K.G. Varnava, B.N. Ratha, S. Raha, D. Bhattacharyya, **Z. Gazova**, V. Sarojini, A.K. Mandal, A. Bhunia: *Targeted inhibition of amyloidogenesis using a non-toxic, serum stable strategically designed cyclic peptide with therapeutic implications.*

**Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics 1868 (2020) 140378, IF = 2.371**

[8] M. Barbalinardo, **A. Antosova**, M. Gambucci, **Z. Bednarikova**, C. Albonetti, F. Valle, P. Sassi, L. Latterini, **Z. Gazova**, E. Bystrenova: *Effect of metallic nanoparticles on amyloid fibrils and their influence to neural cell toxicity.*

**Nano Research 13 (2020) 1081, IF = 8.04**

[9] **M. Gancar**, K. Ho, S.A. Mohid, N.Q. Thai, **Z. Bednarikova**, H.L. Nguyen, A. Bhunia, E. Nepovimova, M.S. Li, **Z. Gazova**: *7-Methoxytacrine and 2-Aminobenzothiazole Heterodimers: Structure-Mechanism Relationship of Amyloid Inhibitors Based on Rational Design.*

**ACS Chemical Neuroscience 11 (2020) 715, IF = 4.486**

[10] B.N. Ratha, R.K. Kar, **Z. Bednarikova**, **Z. Gazova**, S.A. Kotler, S. Raha, S. De, N.C. Maiti, A. Bhunia: *Molecular Details of a Salt Bridge and Its Role in Insulin Fibrillation by NMR and Raman Spectroscopic Analysis.*

**Journal of Physical Chemistry B 124 (2020) 1125, IF = 2.857**

## Magnetizmus a supravodivosť boridov vzácnych zemín

**Projekt:** APVV-17-0020, APVV-14-0605, DAAD-SAS, VEGA 2/0032/20, VEGA 2/0032/16

**Riešiteľ:** K. Flachbart, S. Gabáni, E. Gažo, M. Orendáč, G. Pristáš, J. Bačkai, P. Diko, P. Farkašovský, L. Regeciová

Súbor siedmych prác (zastrešený prehľadovou publikáciou [1]) sa zaoberá experimentálnym a teoretickým štúdiom magnetických a supravodivých vlastností vo vybraných boridoch vzácnych zemín, ktoré sú považované za prototyp zlúčenín pri skúmaní viacerých fyzikálnych fenoménov. Konkrétne ide o priekopnícky výskum: (i) topologického Kondo izolátora  $\text{SmB}_6$  metódou ARPES a STM [2]; magnetokalorického javu a spinovej dynamiky geometricky frustrovaného magnetu  $\text{TmB}_4$  so Shastryho-Sutherlandovou mriežkou [3-5]; anizotropie magnetotransportu v *fcc* antiferromagete  $\text{HoB}_{12}$  vykazujúcom nábojové dynamické pásy [6]; vplyvu dopovania na fázový diagram a zmenu vlastností BCS supravodiča I. typu  $\text{LuB}_{12}$  [7].

[1] **S. Gabáni, K. Flachbart, K. Siemensmeyer, T. Mori:** *Magnetism and superconductivity of rare earth borides.*

**Journal of Alloys and Compounds 821 (2020) 153201, IF = 4.650**

[2] H. Herrmann, P. Hlawenka, K. Siemensmeyer, E. Weschke, J. Sánchez-Barriga, A. Varykhalov, N.Y. Shitsevalova, A.V. Dukhnenko, V.B. Filipov, **S. Gabáni, K. Flachbart, O. Rader, M. Sterrer, E.D.L. Rienks:** *Contrast Reversal in Scanning Tunneling Microscopy and Its Implications for the Topological Classification of  $\text{SmB}_6$ .*

**Advanced Materials 2020, 1906725, IF = 27.398, Nature Index**

[3] **Mat. Orendáč, P. Farkašovský, L. Regeciová, S. Gabáni, G. Pristáš, E. Gažo, J. Bačkai, P. Diko, A. Dukhnenko, N. Shitsevalova, K. Siemensmeyer, K. Flachbart:** *Tuning the magnetocaloric effect in Lu doped frustrated Shastry-Sutherland system  $\text{TmB}_4$ .*

**Physical Review B 102 (2020) 174422, IF = 3.575**

[4] **Mat. Orendáč, P. Farkašovský, L. Regeciová, K. Flachbart, S. Gabáni, E. Gažo, G. Pristáš, A. Dukhnenko, N. Shitsevalova, K. Siemensmeyer:** *Microscopic Description of Rotating Magnetocaloric Effect in Frustrated Antiferromagnetic System  $\text{TmB}_4$ .*

**Acta Physica Polonica A 137 (2020) 764, IF = 0.579**

[5] **S. Gabáni, I. Takáčová, Mat. Orendáč, G. Pristáš, E. Gažo, K. Siemensmeyer, A. Bogach, N. Sluchanko, N. Shitsevalova, J. Prokleška, V. Sechovský, K. Flachbart:** *Spin, charge and lattice dynamics of magnetization processes in frustrated Shastry-Sutherland system  $\text{TmB}_4$ .*

**Solid State Sciences 105 (2020) 106210, IF = 2.434**

[6] K.M. Krasikov, A.V. Bogach, A.D. Bozhko, V.V. Glushkov, S.V. Demishev, A.L. Khoroshilov, N.Yu. Shitsevalova, V. Filipov, **S. Gabáni, K. Flachbart, N.E. Sluchanko:** *Anisotropy of the charge transport in  $\text{Ho}^{\text{II}}\text{B}_{12}$  antiferromagnet with dynamic charge stripes.*

**Solid State Sciences 104 (2020) 106253, IF = 2.434**

[7] **J. Bačkai, S. Gabáni, K. Flachbart, E. Gažo, J. Kušnir, M. Orendáč, G. Pristáš, N. Sluchanko, A. Dukhnenko, V. Filipov, N. Shitsevalova:** *Superconducting Phase Diagrams of  $\text{LuB}_{12}$  and  $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{B}_{12}$  ( $x \leq 0.45$ ) down to 50 mK.*

**Acta Physica Polonica A 137 (2020) 791, IF = 0.579**

## **Súťaž mladých vedeckých pracovníkov ÚEF SAV 2020**

### *I. miesto*

**Ing. Matúš Molčan, PhD.**

Charakterizácia magnetických nanosystémov so zameraním na magnetickú hypertermiu

**RNDr. Eubomíra Regeciová**

Teoretické štúdium magnetizačných procesov v tetraboridoch vzácnych zemín

### *II. miesto*

**RNDr. Miroslav Gančár, PhD.**

Vplyv malých molekúl na amyloidnú agregáciu globulárnych proteínov

**Ing. Petra Hajdová, PhD.**

Príprava, štruktúra a vlastnosti SmBCO masívnych monokryštálických supravodičov

### *III. miesto*

**RNDr. Matúš Orendáč, PhD.**

Magnetokalorický jav v „Lu-riedenom“ frustrovanom kovovom systéme TmB<sub>4</sub>

**RNDr. Katarína Zakuťanská**

Štrukturalizačné javy v kompozitoch na báze kvapalných kryštálov