

Publikace a data v OpenAIRE

OpenAIRE (Open Access Infrastructure for Research in Europe) je projekt, jehož cílem je vybudování infrastruktury a podpory pro otevřený přístup k výsledkům (recenzovaným výzkumným článkům) vědeckých projektů financovaných z prostředků Evropské unie.

Data z Repozitáře ASEP jsou 1x týdně pravidelně automaticky sklízena do OpenAIRE přes OAI-PMH protokol.

K 1. 10. 2018 je na platformě k dispozici 8,103 záznamů z Repozitáře ASEP.

Podmínky pro sklizení jsou:

- druhy dokumentů: **J, B, M, C/K, V, P**
- datum vydání 2005-2018,
- s přiloženým plným textem (přístupný open access nebo na vyžádání).

- 1. Jaká data a publikace lze zveřejňovat v OpenAIRE?**
- 2. Zápis publikace do Repozitáře ASEP**
- 3. Uložení vědeckých dat do Repozitáře ASEP**
- 4. Zobrazení publikace v OpenAIRE**

1. Jaká data a publikace lze zveřejňovat v OpenAIRE?

Publikace:

Všechny projekty H2020 musí zajistit otevřený přístup (OA) pro všechny recenzované vědecké publikace, které jsou výsledkem aktivit projektu, nejlépe okamžitě, ale jinak do 6/12 měsíců od zveřejnění, v případě embarga vydavatele. Kromě jiných opatření, může nedodržení této povinnosti vést ke krácení finančních prostředků projektu.

- Evropská Komise vyžaduje uložení publikací do repozitáře přizpůsobeného OpenAIRE, **což ASEP splňuje.**

Výzkumná data:

Projekty v určených oblastech H2020 se mají podílet na pilotním projektu, aby jejich výzkumná data byla otevřeně k dispozici pro použití jinými výzkumníky (z toho pilotního projektu je však možné se vyvázat).

- V Repozitáři ASEP lze vědecká data ukládat. Je možné propojit záznamy publikací a jiných vědeckých výsledků s vědeckými daty uloženými v datovém repozitáři.

2. Zápis publikace do ASEP

- Autor (nebo zpracovatel publikační činnosti v ústavu) zapíše záznam publikace.
- Je nutné [správně zapsat evropský projekt](#), aby se informace o projektu zobrazila u záznamu v OpenAIRE
- K zapsanému bibliografickému záznamu v ASEP autor nebo zpracovatel uloží finální recenzovanou verzi rukopisu nebo vydavatelskou verzi nejpozději v době vydání článku. Pokud to podmínky umožňují, zajistí otevřený přístup k publikaci. Embargo 6/12 měsíců je povoleno, pokud jej vyžaduje vydavatel.
- Po uložení je záznamu přidělen persistentní identifikátor (handle). (zveřejnění seznamu publikací nebo vědeckých dat na webových stránkách projektu není dostačující).

1. **0490401** - FZU-D 2019 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku ← **Správný druh dokumentu**
Foti, Giuseppe - Vázquez, Héctor
 Origin of vibrational instabilities in molecular wires with separated electronic states.
Journal of Physical Chemistry Letters. Roč. 9, č. 11 (2018), s. 2791-2796 ISSN 1948-7185
 Grant CEP: GA ČR GA15-19672S
 GRANT EU: European Commission(XE) 709114 - HEATEXMOL ← **Správně zapsaný projekt EU**
 Institucionální podpora: RVO:68378271
 Klíčová slova: current-induced heating * electronic excitation * first-principles calculation
 Kód oboru RIV: BM - Fyzika pevných látek a magnetismus
 Obor OECD: Condensed matter physics (including formerly solid state physics, supercond.)
 Impakt faktor: 8.709, rok: 2017
 Trvalý link: <http://hdl.handle.net/11104/0284642> **Přiložený plný text v otevřeném režimu**

	Název souboru	Staženo	Velikost	Komentář	Verze	Přístup
	0490401.pdf	3	1.2 MB		Vydavatelský postprint	povolen

Obr. 1. Záznam článku v ASEP s evropským projektem

3. Zápis vědeckých dat do Repozitáře ASEP

- Do repozitáře ASEP lze uložit datový záznam a dataset.
- Pokud jsou datasety uloženy v jiném repozitáři či úložišti, lze vytvořit jen datový záznam a uvést odkaz na dataset.
- V bibliografickém záznamu v ASEP lze vytvořit odkaz na data v jiném repozitáři.
- Datové a bibliografické záznamy v ASEP lze vzájemně propojit.
- Před uložením dat je nutné vytvořit Data management plan – popis vědeckých dat (vytváří autor).

4. Zobrazení záznamu v OpenAire

Záznamy z repozitáře ASEP jsou pravidelně sklizeny do OpenAIRE. Po sklizení dat OAI-setem probíhá v OpenAIRE kontrola záznamů, která může trvat i několik týdnů. Ověření údajů do autority projektu probíhá v databázi evropských projektů - CORDIS. Cca za měsíc je záznam indexován.

1. **0484818** - FZU-D 2018 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku
De La Torre Cerdeño, Bruno - Švec, Martin - Foti, Giuseppe - Krejčí, Ondřej - Hapala, Prokop - Garcia-Lekue, A. - Frederiksen, T. - Zbořil, R. - Arnau, A. - Vázquez, Héctor - Jelínek, Pavel
 Submolecular resolution by variation of the inelastic electron tunneling spectroscopy amplitude and its relation to the AFM/STM signal.
Physical Review Letters. Roč. 119, č. 16 (2017), s. 1-6, č. článku 166001. ISSN 0031-9007
 Grant CEP: GA ČR GA15-19672S; GA ČR GJ17-24210Y
GRANT EU: European Commission(XE) 709114 - HEATEXMOL
 Grant ostatní:AV ČR(CZ) AP1601
 Program:Akademická prémie - Praemium Academiae
 Institucionální podpora: RVO:68378271
 Klíčová slova: noncontact atomic force microscopy * first principles calculations * density functional theory * nonequilibrium Green's function * scanning probe microscop
 Kód oboru RIV: BM - Fyzika pevných látek a magnetismus
 Obor OECD: Condensed matter physics (including formerly solid state physics, supercond.)
 Impakt faktor: 8.839, rok: 2017
 Trvalý link: <http://hdl.handle.net/11104/0279954>

Do košíku
 RIV
 DOI
 WOS
 SCOPUS
 Bookmark

	Název souboru	Staženo	Velikost	Komentář	Verze	Přístup
	0484818.pdf	2	2.4 MB		Vydavatelský postprint	<u>povoleno</u>

Obr. 2. Záznam v repozitáři ASEP s evropským projektem

OpenAIRE | EXPLORE

SEARCH SHARE LINK CONTENT PROVIDERS Sign in

Origin of vibrational instabilities in molecular wires with separated electronic states

Article English **OPEN**

Foti, G. (Giuseppe); Vázquez, H. (Héctor) (2018)

Related identifiers: [doi: 10.1021/acs.jpcl.8b00940](#)

Subject: first-principles calculation | electronic excitation | current-induced heating

arxiv: Physics:Atomic and Molecular Clusters | Physics:Chemical Physics

Status plného textu

Current-induced heating in molecular junctions stems from the interaction between tunneling electrons and localized molecular vibrations. If the electronic excitation of a given vibrational mode exceeds heat dissipation, a situation known as vibrational instability is established, which can seriously compromise the integrity of the junction. Using out of equilibrium first-principles calculations, we demonstrate that vibrational instabilities can take place in the general case of molecular wires with separated unoccupied electronic states. From the ab initio results, we derive a model to characterize unstable vibrational modes and construct a diagram that maps mode stability. These results generalize previous theoretical work and predict vibrational instabilities in a new regime.

Metrics +

Share - Boc

Odkaz do Repozitáře ASEP

Download from

Repository of the Czech Academy of Sciences via
 Repository of the Czech Academy of Sciences
 (Article, 2018)

Funded by

EC | HEATEXMOL

Cite this publication

select an organization

[Link this publication to...](#)

Propojení s projektem EU

Obr. 3. Sklizený záznam z Repozitáře ASEP v OpenAIRE

V případě, že je výsledek uložen ve více repozitářích, v OpenAIRE se vytvoří vždy jeden záznam výsledku s metadaty a odkazy do všech repozitářů. U výsledku je uveden status plného textu. V případě open access je možné získat plný text přes odkaz do repozitáře.

The screenshot shows the OpenAIRE interface for an article titled "Submolecular Resolution by Variation of the Inelastic Electron Tunneling Spectroscopy Amplitude and its Relation to the AFM/STM Signal".

Annotations:

- Odkaz do Repozitáře ASEP a repozitáře arXive:** Points to the "Download from" section, which lists:
 - Repository of the Czech Academy of Sciences via Repository of the Czech Academy of Sciences (Article, 2017)
 - arXiv.org e-Print Archive via arXiv.org e-Print Archive (Preprint, 2017)
- Status plného textu:** Points to the "OPEN" button in the language selection area.
- Propojení na projekty EU:** Points to the "Funded by" section, which lists:
 - EC | HEATEXMOL
 - EC | PAMS

Article Metadata:

- Journal:** (issn: 0031-9007, vol: 119)
- Related identifiers:** doi: 10.1103/physrevlett.119.166001
- Subject:** nonequilibrium Green's function | first principles calculations | scanning probe microscop | noncontact atomic force microscopy | density functional theory | Condensed Matter - Materials Science
- arxiv:** Mathematics::Dynamical Systems

Abstract: Here we show scanning tunneling microscopy (STM), noncontact atomic force microscopy (AFM), and inelastic electron tunneling spectroscopy (IETS) measurements on an organic molecule with a CO-terminated tip at 5 K. The high-resolution contrast observed simultaneously in all channels unambiguously demonstrates the common imaging mechanism in STM/AFM/IETS, related to the lateral bending of the CO-functionalized tip. The IETS spectroscopy reveals that the submolecular contrast at 5 K consists of both renormalization of vibrational frequency and variation of the amplitude of the IETS signal. This finding is also corroborated by first principles simulations. We extend accordingly the probe-particle AFM/STM/IETS model to include these two main ingredients necessary to reproduce the high-resolution IETS contrast. We also employ the first principles simulations to get more insight into a different response of frustrated translation and rotational modes of the CO tip during imaging.

Obr. 4. Článek dodaný do OpenAIRE Repozitářem ASEP a arXive.org s propojením na projekty EU