



Програм научноистраживачког рада Центра за изучавање комплексних система Института за физику у Београду

Комплексни системи су једна од важних парадигми у савременој физици, при чему је једна од њихових основних особина да нетривијално понашање може да буде последица чак и релативно једноставних интеракција између великог броја градивних елемената. За разлику од система које можемо да проучавамо користећи принципе статистичке физике, код којих присуство великог броја честица обично води до једноставнијег понашања целине, комплексни системи су шира категорија и обухватају не само физичке системе у традиционалном смислу тог израза, већ и социјалне, биолошке и технолошке системе. Сарадници Центра примењују широк спектар метода теоријске физике, као и нумеричке симулације и нумеричко моделирање, а у неким областима и експерименталне методе за проучавање великог броја комплексних система. Иако нумерички приступ представља један од најчешће коришћених, основни циљ свих истраживања Центра нису појединачни нумерички резултати, већ ново знање о комплексним системима, физичке законитости које описују њихово понашање, као и везе између различитих класа комплексних система.

С обзиром на велики број зрелих и искусних истраживача у Центру, научноистраживачки рад се одвија у оквиру више разнородних потпројеката, а сви потпројекти су организовани кроз истраживачке теме. Сваки потпројекат Центра предводи један искусан руководиоца, а у раду учествује још неколико истраживача са докторатом и бар један студент докторских студија (или се планира њихово ангажовање). Интензиван и квалитетан рад са младим истраживачима је једна од кључних одлика Центра, као и њихова сарадња у оквиру различитих тема, што омогућава шире образовање и упознавање са већим бројем истраживачких метода.

Истраживачи Центра за изучавање комплексних система:

1. др Антун Балаж, научни саветник, руководиоца Центра
2. др Александар Белић, научни саветник
3. др Александар Богојевић, научни саветник
4. др Слободан Врховац, научни саветник
5. др Ненад Вукмировић, научни саветник
6. др Драган Драмлић, научни саветник
7. др Зорица Јакшић, научни саветник
8. др Милица Миловановић, научни саветник
9. др Слободан Првановић, научни саветник
10. др Дарко Танасковић, научни саветник
11. др Ивана Васић, виши научни сарадник
12. др Марија Митровић Данкулов, виши научни сарадник
13. др Игор Станковић, виши научни сарадник
14. др Јакша Вучичевић, научни сарадник
15. др Саша Лазовић, научни сарадник
16. др Никола Продановић, научни сарадник
17. др Милан Радоњић, научни сарадник

18. др Милош Радоњић, научни сарадник
19. др Игор Франовић, научни сарадник
20. др Михаило Чубровић, научни сарадник
21. др Јулија Шћепановић, научни сарадник

Млади истраживачи Центра за изучавање комплексних система (студенти докторских студија и истраживачи са докторатом који још нису стекли научно звање, или се налазе на постдокторском усавршавању у иностранству):

22. др Александра Алорић
23. др Владимир Лончар
24. др Марко Младеновић
25. др Јелена Смиљанић
26. Ива Бачић
27. Владимир Вељић
28. Ана Вранић
29. Душан Вудраговић
30. Willem-Victor van Gerven Oei
31. Миљан Дашић
32. Вељко Јанковић
33. Милан Јоцић
34. Даница Стојиљковић
35. Ана Худомал

Област научноистраживачког рада свих истраживача Центра за изучавање комплексних система су природно-математичке науке, физика.

Истраживачи Центра ангажовани у израдама докторских теза – менторски рад:

1. Др Антун Балаж је ментор у изради докторских теза Владимира Вељића и Душана Вудраговића на Физичком факултету Универзитета у Београду.
2. Др Антун Балаж је био ментор докторских дисертација Владимира Лончара и Богдана Сатарића. Владимир Лончар је докторску тезу под називом "Hybrid Parallel Algorithms for Solving Nonlinear Schroedinger Equation" одбранио 2017. на Природно-математичком факултету Универзитета у Новом Саду. Богдан Сатарић је докторску тезу под називом "Паралелно транспоновање података у оквиру нумеричког алгорита за решавање Грос-Питаевски једначине" одбранио 2017. на Факултету техничких наука Универзитета у Новом Саду.
3. Др Слободан Врховац је ментор у изради докторске тезе Данице Стојиљковић на Физичком факултету Универзитета у Београду.
4. Др Слободан Врховац је био ментор докторске дисертације Јулије Шћепановић, која је тезу под називом "Релаксациона својства модела субдифузивног гаса на троугаоној решетки" одбранила 2014. године на Физичком факултету Универзитета у Београду.
5. Др Ненад Вукмировић је ментор у изради докторских теза Вељка Јанковића на Физичком факултету Универзитета у Београду, Жарка Бодрошког на Природно-математичком факултету Универзитета у Новом Саду и Милана Јоцића на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу.
6. Др Ненад Вукмировић је био ментор докторских дисертација Николе Продановића и Марка Младеновића. Никола Продановић је докторску тезу под називом "Semiconductor Quantum Dots: Intraband Electronic, Optical and Carrier Dynamical Properties" одбранио 2014. године на Универзитету у Лидсу, Велика Британија. Марко Младеновић је докторску тезу под називом "Electronic Properties of Interfaces Between Domains in Organic Semiconductors" одбранио 2017. године на Електротехничком факултету Универзитета у Београду.

7. Др Ивана Васић је ментор у изради докторске тезе Ане Худомал на Физичком факултету Универзитета у Београду.
8. Др Марија Митровић Данкулов је ментор у изради докторске тезе Ане Вранић на Физичком факултету Универзитета у Београду.
9. Др Марија Митровић Данкулов је била ментор докторске дисертације Јелене Смиљанић, која је тезу под називом "Испитивање својстава комплексних мрежа са дискретном динамиком" одбранила 2017. године на Електротехничком факултету Универзитета у Београду.
10. Др Игор Станковић је ментор у изради докторске тезе Миљана Дашића на Физичком факултету Универзитета у Београду.
11. Др Игор Станковић је био ментор докторске дисертације Милана Жежеља, који је тезу под називом "Modeling and Optimization of Transport Processes in Modern Nanoelectronic Devices" одбранио 2017. године на Електротехничком факултету Универзитета у Београду.
12. Др Игор Франовић је ментор у изради докторске тезе Иве Бачић на Физичком факултету Универзитета у Београду.
13. Др Зорица Јакшић је била ментор докторске дисертације Светлане Живковић, која је тезу под називом "Структуралне промене у грануларном материјалу током процеса компактификације" одбранила 2014. године на Физичком факултету Универзитета у Београду.
14. Др Дарко Танасковић је ментор у изради докторске тезе Willem-Victor van Gerven Oei-a на Физичком факултету Универзитета у Београду.
15. Др Дарко Танасковић је био ментор докторских дисертација Милоша Радоњића и Јакше Вучичевића. Милош Радоњић је докторску тезу под називом "Influence of Disorder on Charge Transport in Strongly Correlated Materials Near the Metal-insulator transition" одбранио 2014. године на Физичком факултету Универзитета у Београду. Јакша Вучичевић је докторску тезу под називом "Signatures of Hidden Quantum Criticality in the High-temperature Charge Transport Near the Mott Transition" одбранио 2015. године на Физичком факултету Универзитета у Београду.
16. Др Саша Лазовић је ментор у изради докторске тезе Тајјане Митровић на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду.
17. Др Милан Радоњић је био ментор докторске дисертације Анђела Мађитија, који је тезу под називом "Formation of dark-state polaritons and two-polariton bound states in arrays of atoms and optical cavities" одбранио 2016. године на Физичком факултету Универзитета у Београду.

Истраживачи Центра ангажовани у комисијама за одбрану докторских теза:

1. Др Антун Балаж је био члан комисија за одбрану докторских теза др Јелене Смиљанић и др Марка Младеновића на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, др Милоша Радоњића на Физичком факултету Универзитета у Београду, као и др Ане Капларовић-Малишић на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу.
2. Др Ненад Вукмировић је био члан комисије за одбрану докторске тезе др Јакше Вучичевића на Физичком факултету Универзитета у Београду.

Истраживачи Центра ангажовани у настави на докторским студијама

Докторске студије физике, Физички факултет, Универзитет у Београду

Ужа научна област: Физика кондензоване материје и статистичка физика

1. Др Антун Балаж је ангажован као наставник за предмет Квантне течности (ФИЗДФКМ13)

2. Др Милица Миловановић је ангажован као наставник за предмет Квантна теорија поља у физици нискодимензионалних система (ФИЗДФКМ2)
3. Др Ненад Вукмировић је ангажован као наставник за предмет Теорија функционала густине (ФИЗДФКМ14)
4. Др Дарко Танасковић је ангажован као наставник за предмет Електронски транспорт у јако корелисаним системима (ФИЗДФКМ15)

Ужа научна област: Квантна, математичка и нанофизика

1. Др Никола Бурић (који је преминуо у јануару 2016. године) је био ангажован као наставник за предмете Нелинеарни динамички системи (ФИЗДФКН7) и Квантна механика комплексних система (ФИЗДФК9)

Рачунарски предмети за више научних области

1. Др Антун Балаж је ангажован као наставник за предмет Монте Карло симулације у физици (ФИЗДФВО2)

Учешће у телима за академске студије другог и трећег степена

1. Др Антун Балаж је члан Колегијума докторских студија Физичког факултета Универзитета у Београду
2. Др Антун Балаж је члан Стручног већа Центра за примењену статистику Универзитета у Новом Саду

Програм рада Центра

У наставку је дат преглед истраживачких потпројеката Центра и сарадника који на њима раде.

Потпројекат 1: Динамика ултрахладних атома

Руководилац: **др Ивана Васић**

Учесници: др Ивана Васић, др Милан Радоњић, др Владимир Лончар, др Александар Богојевић, др Антун Балаж

Студенти докторских студија: Ана Худомал (ментор др Ивана Васић), Владимир Вељић (ментор др Антун Балаж), Душан Вудраговић (ментор др Антун Балаж)

Проучавање колективних особина хладних атома је важна тема савремене физике. На почетку, велико интересовање за ове системе било је подстакнуто реализацијом Бозе-Ајнштајн кондензације. За овај искорак било је неопходно охладити атомски гас бозона на температуру реда нанокелвина, а међуатомске интеракције су биле релативно слабе.

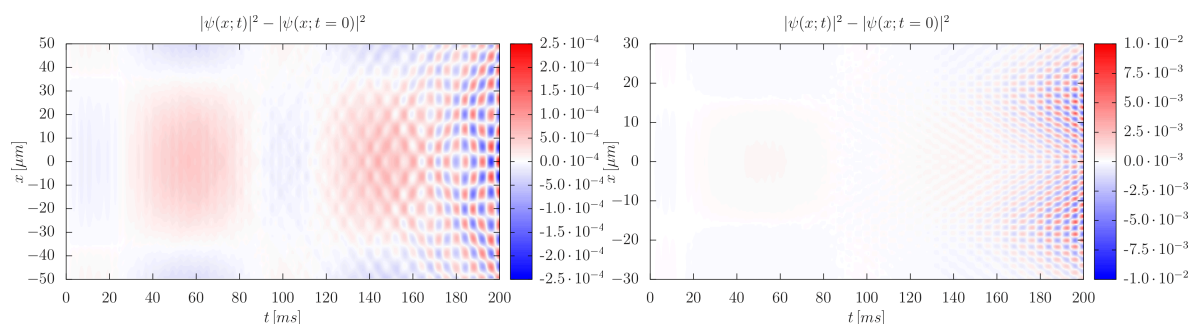
У модерним експериментима температурни опсег је задржан, али се фокус са слабих интеракција померио на јаке локалне интеракције, као и дугодометне и анизотропне дипол-дипол интеракције. Другим речима, данас су ови системи на корак од квантних симулатора јер представљају сложене вишечестичне, макроскопске системе описане законима квантне механике, чији се релевантни параметри могу мењати у широком опсегу. Сем бозонских, разматрају се и фермионски атоми, а недавно су реализована и јака синтетичка магнетна поља за ове системе. Поред тога, и неуређеност ових система се може добро контролисати, чак и на динамички начин. Сви ови елементи – различите врсте интеракција, магнетна поља, различита статистика (бозонска или фермионска), контролисана неуређеност – пружају могућност за проналажење и испитивање нових квантних фаза. Детекција и разумевање тих фаза је базирана на прецизном мерењу одговора атомског облака на различите побуде. У оквиру овог потпројекта ћемо

примењивати и развијати аналитичке и нумеричке методе којима се могу описати динамички протоколи у најновијим експериментима са хладним атомима.

Истраживачки рад ће се одвијати у оквиру следећих тема:

Тема 1.1: Бозонски системи са контактним и дипол-дипол интеракцијама

Присуство дугодометних дипол-дипол интеракција у ултрахладних бозонским системима на значајан начин мења њихове особине, а посебно колективне моде и стабилност система. На значајан начин се мења и одговор система на спољашњу побуду. Због тога ћемо проучавати утицај дипол-дипол интеракције на формирање Фарадејевих таласа и параметарских резонанци изазваних хармонијским модулисањем јачине интеракције и замке у којој се налази систем, што је илустровано на слици 1.1.



Слика 1.1: Фарадејеви таласи индуковани хармонијском модулацијом замке у Бозе-Ајнштајн кондензату хрома (лево) и диспрозијума (десно) [Vudragović et al., in preparation].

Проучаваћемо и формирање и стабилизацију квантних дроплета који су експериментално добијени претходне године, као и вортексе унутар дроплета. Главни метод који ћемо користити је теорија средњег поља, односно развој и нумеричке симулације ефективне Грос-Питаевски једначине, која ће укључити и најзначајније квантне корекције, што подразумева извођење Ли-Хуанг-Јанг корекција за диполну интеракцију.

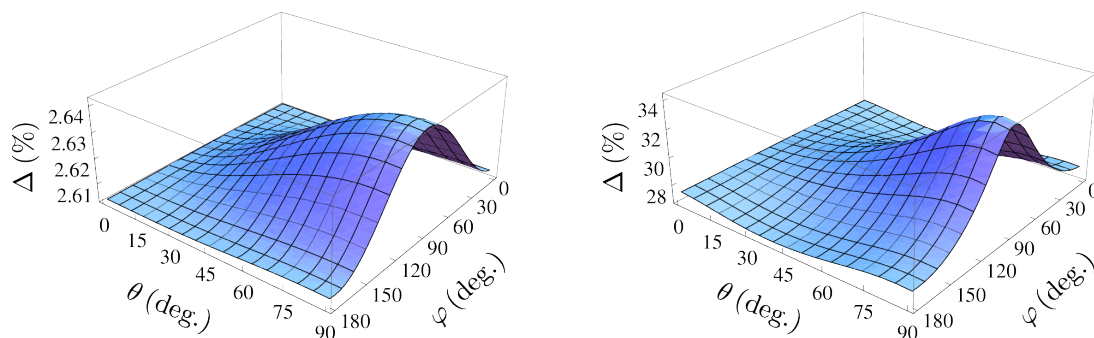
Истраживања у оквиру ове теме представљаће основу за докторски рад Душана Вудраговића.

Тема 1.2: Фермионски системи са дипол-дипол интеракцијама

Дугодометна и анизотропна дипол-дипол интеракција у ултрахладним фермионским системима доводи до нових вишечестичних ефеката, као што је деформација Ферми сфере која је експериментално измерена 2014. године. Нови експериментални резултати из 2018. године, који представљају прву реализацију квантно дегенерисаног фермионског гаса поларних молекула K₂Rb са великим перманентним електричним диполним моментом, отварају врата експерименталном истраживању ултрахладних фермиона у јако диполном режиму. Ово је илустровано на слици 1.2.

У оквиру ове теме ћемо проучавати управо овакве системе користећи квантну Болцманову једначину за Вигнерову функцију. Овај приступ омогућава аналитичко и нумеричко проучавање деформације Ферми површи и колективне осцилације система. У плану је развој формализма за системе са произвољном оријентацијом диполних момената у односу на оријентацију потенцијалне замке у којој се систем налази. У сарадњи са експерименталном групом са Универзитета у Инзбруку и теоријском групом са Техничког универзитета у Кајзерслаутерну у плану је верификација теорије кроз поређење њених предвиђања са експерименталним резултатима. Овај приступ

омогућава и проучавање динамике система, као и моделирање небалистичке експанзије у time-of-flight мерењима која се користе у овим експериментима, па ће и ови аспекти бити развијени и проверени.



Слика 1.2: Угаона зависност деформације Ферми површи за ербијум (лево) и молекуларни KRb (десно) [Veljić et al., *New J. Phys.* **20**, in press (2018); DOI: 10.1088/1367-2630/aade24].

Истраживања у оквиру ове теме представљаће основу за докторски рад Владимира Вељића.

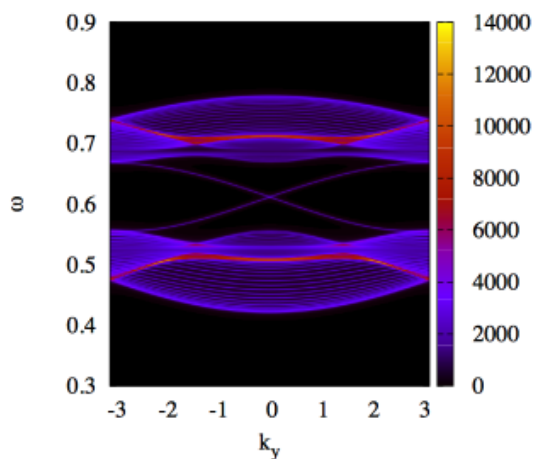
Тема 1.3: Бозони у оптичким решеткама

Да би се омогућиле квантне симулације системима физике кондензоване материје помоћу ултрахладних атома, користи се ласерска светлост која ствара периодични потенцијал за атоме, односно оптичке решетке. За случај бозонских атома, ова поставка се добро описује Бозе-Хабард моделом и омогућава испитивање система у режиму јаких интеракција. Јаке интеракције потискују флукуације густине атома и воде квантном фазном прелазу из суперфлуидног у Мот изолатор стање. Док је одговор кондензата на спољашње побуде доста проучаван, много мање се зна о одговору Мот изолатор стања. Најновији експерименти се управо баве транспортним мерењима у овим системима у режиму јаких интеракција. Један пример побуде је изненадни померај хармонијске замке, који изазива осцилаторно кретање центра масе кондензата и спору релаксацију центра Мот стања у нови равнотежни положај. Наш циљ је пружање реалистичног теоријског описа ових мерења и квантитативно поређења са експериментом. За одређивање релевантних фазних дијаграма применићемо бозонску динамичку теорију средњег поља, а за симулације временске динамике Гуцвилерову теорију средњег поља.

Тема 1.4: Синтетичка магнетна поља

Јака магнетна поља су у основи важних физичких феномена као што је квантни Холов ефекат. Међутим, за разлику од електрона, атоми су неутралне честице, па се у систем хладних атома јака магнетна поља морају увести на посредан, ефективан начин. У најновијим експериментима синтетичка поља се уводе периодичним вођењем система. Теоријски и експериментално је показано да ефективни Хамилтонијан изведен у оквиру Флоке теорије даје кључне моделе физике кондензованог стања: Харпер-Хофштетер и Холдејн модел. Зонску структуру ових модела карактерише нетривијална тополошка инваријанта, Чернов број, која је тек недавно први пут измерена у системима хладних атома и која је у основи поменутог Холовог ефекта. Овај искорак значи да су данас у системима хладних атома доступни и потпуно нови модели (као што је нпр. бозонски Холдејн модел) о чијим фазним дијаграмима се мало зна и који ће нам омогућити проучавање нових квантних фаза. Као пример нове фазе, на слици 1.3 је приказан

ексцитациони спектар егзотичног киралног Мот изолятора [Vasić et al., Phys. Rev. B **91**, 094502 (2015)].



Слика 1.3: Ексцитације киралног Мот изолятора за бозонски Холдејн модел [Vasić et al., Phys. Rev. B **91**, 094502 (2015)].

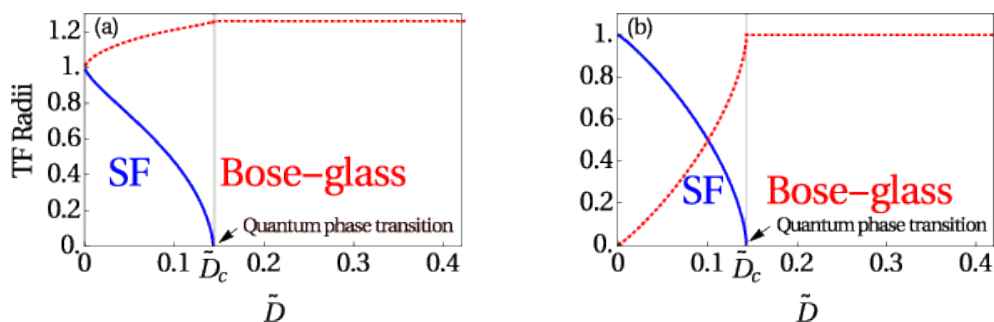
Доступност јаких синтетичких магнетних поља и јаких интеракција у принципу омогућава и проучавање тополошких фаза које одговарају стањима из фракционог Холовог ефекта. Ова стања имају специјалне ексцитације, које их чине важним кандидатима за физичку основу квантног рачунара, па је њихова реализација у системима хладних атома од веома великог интереса. Међутим, интеракције у периодично осцилованом систему значајно усложњавају ефективни Флоке опис и уводе неизбежно загревање система. Наш циљ је налажење оптималног експерименталног режима као и одређивање реалистичних временских скала на којима систем може имати очекивана тополошка својства. У првом кораку ћемо истражити утицај слабих интеракција на мерење Черновог броја и ширење атомског облака. Објаснићемо експериментално уочене прелазе атома у више зоне ефективног модела. У наредном кораку испитиваћемо стабилност фракционих Холових стања у вођеним системима, што захтева узимање у обзир јаких интеракција. За опис слабо интерагујућих бозона користићемо теорију средњег поља за некохрентне (некондензоване) бозоне, а за разумевање јако корелисаних фаза применићемо егзактну дијагонализацију. Нумерички ћемо симулирати пуну временску еволуцију система и упоређивати добијене резултате са апроксимативним описом који одговара ефективном Хамилтонијану.

Истраживања у оквиру ове теме представљаће основу за докторски рад Ане Худомал.

Тема 1.5: Утицај динамичког неуређења на особине Бозе-Ајнштајн кондензата

Системи у природи су нужно изложени разним случајним спољашњим утицајима који смањују њихову уређеност тј. неизбежно доводе до појаве неуређености. Циљ истраживања утицаја неуређења је у стицању знања о његовом утицају на проучаване системе и могућности за његову наменску примену. Тиме се постиже да контролисано неуређење више није отежавајућа околност, већ доступни ресурс који се може користити у различите сврхе. У случају слабо интерагујућег гаса ултрахладних бозона који се налази у статичном неуређеном потенцијалу познато је да долази до појаве локалних кондензата у случајно распоређеним минимумима таквог потенцијала. У зависности од особина неуређења, као што су јачина и корелациона дужина, мења се однос броја бозона који се налазе у глобалном кондензату и у локалним кондензатима. Промена поменутог односа одражава се на прелаз из суперфлуидне фазе у фазу Бозе-стакла. Потоња фаза се одликује мноштвом локалних кондензата и одсуством глобалног

кондензата, као и низом разлика у односу на глобалну суперфлуидну фазу. Ово је илустровано на слици 1.4.



Слика 1.4: Квантни фазни прелаз из суперфлуидног стања у Бозе-стакло под утицајем неуређења у Томас-Ферми апроксимацији [Khellil, Balaž, Pelster, *New J. Phys.* **18**, 063003 (2016)].

Данас доступни тзв. просторни модулатори светлости омогућавају остваривање контролисаних динамичких оптичких потенцијала у Бозе-Ајнштајн кондензатима. Такви уређаји се могу користити за реализацију различитих просторно-временски променљивих замки у којима кондензати еволуирају. Испрва ћемо проучавати како динамика и особине оптичког неуређења утичу на расподелу локалних кондензата. Постоји више различитих сценарија којима ћемо се позабавити: поступни адијабатски прелазак из уређеног стања у стање са оптички неуређеним потенцијалом, брзо успостављање статичног неуређења у иницијално уређеном систему, затим примена временски периодичног просторног неуређења, као и других врста неуређења са различитим временским и просторним корелацијама. Даља истраживања ће обухватити разне динамичке аспекте кондензата у наведеним условима, као што су карактеристична времена релаксације, суперфлуидне карактеристике, простирање таласа (звуча) и сл. За пун опис система користимо временски зависну Грос-Питаевски једначину као и њена уопштења. У ту сврху развићемо и објавити нове кодове у програмском језику С оптимизоване применом најнапреднијих метода паралелизације. Поред тога, развијаћемо и користити пертурбативне и нептурбативне аналитичке приступе као што је развој по кумулантима.

Потпројекат 2: Тополошке фазе

Руководилац: др Милица Миловановић

Учесници: др Милица Миловановић, др Ивана Васић, др Михаило Чубровић

Студенти докторских студија: у овом тренутку на потпројекту су ангажована два студента мастер студија, а очекује се ангажман докторанада након уписа на јесен

Тополошке фазе (ТФ) су фазе кондензоване материје које поседују тополошке инваријанте и чији је опис и идентификација дата преко тих инваријанти. Тиме се ТФ разликују од уобичајених фаза за чији опис користимо параметре уређења. Прва ТФ је идентификована открићем интегралног квантног Холовог ефекта (ИКХЕ) и објашњењем његове изузетне квантизације Холове проводности преко Чернове тополошке инваријанте. ИКХЕ је најпростији тзв. тополошки изолатор који настаје у присуству јаког магнетног поља. Почетком 21. века догодио се веома значајни продор у физици кондензоване материје, када су теоријски предвиђени и експериментално идентификовани тополошки изолатори у три димензије без присуства магнетног поља. Истраживање ТФ је постало један од најважнијих праваца у савременој физици кондензоване материје.

Поред примера ТФ које смо навели, постоје ТФ које поседују тзв. „long-range entanglement”, и тиме комплекснију и богатију тополошку квантизацију. Најпознатији примери ових фаза су стања фракционог квантног Холовог ефекта (ФКХЕ) идентификована у експериментима са јаким магнетним пољем, која се описују Лафлиновим таласним функцијама на специјалним односима (пуњењима) између броја електрона и јачине спољашњег магнетног флуksа. Нека ФКХЕ стања поседују корелације спаривања (стварање Куперових парова) између квазичестица које су у основи феномена ФКХЕ. Изразит пример су тзв. Pfaffian стања које прати стварање парова са јединичним ангуларним моментом (p-wave спаривање). Верује се да тако богата структура, са (а) тзв. неабеловским својствима које могу да симулирају квантне операције и са (б) тополошком заштитом која спречава декохеренцију квантне информације, може да буде у основи будућих квантних рачунара [С. Nayak et al., Rev. Mod. Phys. **80**, 1083 (2008)]. Зато је веома пожељно реализовати ТФ у мање екстремним условима (без јаког магнетног поља) и уопште радити на детаљном разумевању ТФ.

Истраживачки рад ће се одвијати у оквиру следећих тема:

Тема 2.1: Реализација бозонских Лафлинових и Pfaffian стања без спољашњег магнетног поља

У теоријским разматрањима бозонске варијанте стања ФКХЕ су математички једноставније али носе исту нетривијалну структуру које поседују фермионска стања. Системи бозонских атома у оптичким решеткама су кандидати за квантне симулаторе система уобичајених за физику кондензоване материје. Зато је пожељно остварити једноставан дизајн интеракционих и кинетичких параметара за бозонско Лафлиново стање (на пуњењу $\frac{1}{2}$ - прототип стања ФКХЕ) без присуства спољашњег магнетног поља. Ранији предлози укључују системе на комплексним решеткама (фракциони Чернови изолатори), или системи на једноставним (Браве) решеткама али у присуству спољашњег поља.

Полазећи од симетричног гејда у опису најнижег Ландау нивоа (у присуству магнетног поља) може се изабрати базис налик Ваније базису у обичном изолатору са кристалном структуром [I. Panfilov et al., Phys. Rev. B **93**, 125126 (2016)]. У претходном периоду ми смо користили Ландау (анизотропни) гејд као основу наше замишљене (пројектоване) решетке у континууму и дошли, у дуготаласној апроксимацији, до анизотропног ефективног модела који би, очекујемо, подржавао бозонско Лафлиново стање (у одсуству магнетног поља и са интеракцијом која нарушава симетрију на временску инверзију). У овом периоду планирамо да егзактно израчунамо матричне елементе интеракције која подржава Лафлиново стање. То подразумева рад на компјутеру да би касније извршили селекцију релевантних матричних елемената. Након тога неходне су егзактне дијагонализације и провера тополошких особина добијеног стања. Ако је добијени ефективни модел једноставан прећи ћемо на разматрање бозонског Pfaffian стања са жељом да добијемо ефективни анизотропни модел који би на најједноставнији могући начин описивао основне корелације стања и сугерисао начин реализације Pfaffian фазе у експериментима у одсуству магнетног поља.

Тема 2.2: Реализација Pfaffian физике у Дираковим системима са масом

Pfaffian стања и њихов опис се везују за објашњење природе ФКХЕ на пуњењима система електрона са парним имениоцем. Верује се да у основи описа ТФ на пуњењу $5/2$ је Pfaffian физика али нејасно је да ли је то стање оригинални Pfaffian (Мур-Ридово) стање, стање настало изменом честица и шупљина оригиналног Pfaffian-а, тзв. anti-Pfaffian или РН Pfaffian стање које је симетрично на ту измену. Недавна мерења термалних транспортних особина [M. Banerjee et al., arXiv:1710.00492] су сагласна са

својствима РН Pfaffian-a, мада у експериментима не очекујемо присуство симетрије на измену честица и шупљина.

РН Pfaffian је очекивано (као најједноставније) стање са Куперовим паровима квазичестица које су у основи описа електрона на пуњењу $\frac{1}{2}$. Наиме на том пуњењу постоји посебна врста металног стања квазичестица са нетривијалном Бери фазом, и верује се да је најбоља апроксимација (на ниским енергијама) таквог стања (у оквирима теорије поља) дата описом квазичестица на начин Дираковог формализма у две димензије [D. T. Son, Phys. Rev. X **5**, 031027 (2015)]. У претходном периоду проучавали смо у оквиру RPA апроксимације Куперов канал такве једне теорије у којој смо Дираков опис уопштили уводећи масени члан. Масени члан симулира одсуство симетрије на измену честица и шупљина. У наредном периоду бавићемо се проблемима регуларизације теорије и прецизног описа Куперове нестабилности. Разматрања на RPA нивоу указују да у систему треба тражити „hidden order” тј. спаривање посебно одабраних квазичестица. Употребом разних прилаза и техника теорије поља настојаћемо да боље упознамо природу стања са парним именицима.

Један могући приступ овом јако корелисаном проблему је AdS/CFT кореспонденција (анти-де Ситер/конформна кореспонденција). Ту је идеја да се примени дуалност између конформних (квантних критичних) система и квазикласичне гравитације у просторвремену са одређеном геометријом. Пошто је у питању S-дуалност (слаба/јака), јако корелисани проблем своди се на слабо купловну гравитацију. Тако с једне стране проблем постаје приступачнији, а с друге стране добијамо мост између две области (квантне теорије поља на коначној густини и квазикласичне гравитације).

До сада смо формулисали гравитациони опис фермионског система који показује нетривијалну Беријеву фазу. Дисперзиона релација, чак и у случају компресибилног система (без енергетског процепа), генерички нема Диракову сингуларност иако задржава и електронске и шупљинске ексцитације, као и Беријеву фазу једнаку пи. У том смислу, овакав систем се може сматрати јако корелисаном аналогом Дираковог фермиона, и показује да тополошке инваријанте Дираковог фермиона остају чак и у одсуству сингуларитета. После детаљне анализе самог прилаза потребно је успоставити везу са феноменолошком теоријом Сона [D. T. Son, Phys. Rev. X **5**, 031027, (2015)], али и са другим (нумеричким) прилазима опису квантне течности на пуњењу $\frac{1}{2}$. Такође, у оквиру гравитационог прилаза, радићемо на конструисању целог фазног дијаграма у присуству интеракција.

Тема 2.3: Примена теорија са метриком у опису вишекомпонентних ФКХЕ фаза

Недавни рад [Z. Liu, A. Gromov, Z. Papić, arXiv:1803.00030] је показао да разматрање динамике система ФКХЕ тачније еволуције после нагле промене специфичних параметара („geometric quench”), даје интересантне увиде у дуготаласне ексцитације система ФКХЕ. Показано је да се основне колективне ексцитације могу описати као осцилације унутрашње метрике система. С друге стране вишекомпонентни ФКХЕ системи, нарочито они у којима је, за извесни опсег параметара, присутна и дугодометна уређеност су извор нове физике и ТФ. Као пример можемо да истакнемо двослој на тоталном пуњењу једнаком јединици, на средњим растојањима, где можемо очекивати необичне феномене меронског ослобађања и нове ТФ [M. V. Milovanović, E. Dobardžić, Z. Papić, Phys. Rev. B **92**, 195311 (2015)]. Применом поменутог, новог начина анализе ексцитација очекујемо да добијемо бољи увид у (тополошку) природу фазе на средњим растојањима. Паралелно са овим приступом разматраћемо двослој као јако корелисан систем на начин AdS/CFT кореспонденције како би разумели могућа уређења двослоја, улогу вртложних ексцитација и испитали присуство деконфинирајућег фазног прелаза. Испитаћемо и присуство БКТ фазног прелаза на

нултој температури, који је сугерисан неким ранијим истраживањима екситона у не-Дираковим системима, али са истим каналима спаривања [E. Gubankova, M. Čubrović, J. Zaanen, Phys. Rev. D **92**, 086004 (2015)].

Потпројекат 3: Јако корелисани многочестични системи, AdS/CFT кореспонденција и квантна критичност

Руководилац: др Михаило Чубровић

Учесници: др Михаило Чубровић, др Јакша Вучичевић, др Милош Радоњић

Студенти докторских студија: очекује се ангажман нових докторанада

Многочестични системи са јаким интеракцијама до данас су велика тема у физици и извор низа фундаменталних проблема. Очигледно, потребна је како нова методологија, тако и увиђање што ширих аналогија и веза међу познатим резултатима. Наш потпројекат комбинује непертурбативну методологију, AdS/CFT кореспонденцију, и паметно смишљену нумерику са циљем да појасни понашање оваквих система у равнотежи и ван ње. Концепт квантне критичности показује се довољно општим да обухвати феноменологију многих реалистичних система, а можда и нервнотежне појаве. То и је и природна полазна тачка AdS/CFT кореспонденције, која нам може објаснити неке појаве у теорији поља и (квазикласичној) гравитацији свдећи их на заједнички механизам.

Истраживачки рад ће се одвијати у оквиру следећих тема:

Тема 3.1: AdS/CFT модели јако корелисаних система

Јаке интеракције међу електронима су редовна појава у неконвенционалним материјалима који одступају од нормалних метала (нормалне Ферми течности), као што су тешки фермиони, чудни метали и поједине фазе високотемпературних суперпроводника. Ови системи су компресибилни, тј. немају енергетски процеп, па спектар екситација директно даје информацију о макроскопском понашању. Другачији, али блиско повезан проблем је фазни прелаз из метала у Мотов изолатор, где интеракције међу електронима онемогућавају транспорт.

Систематски аналитички приступ јако корелисаним електронима још увек нам недостаје. Нема контролисана теорије пертурбација за фермионе на коначној густини; један начин да се ово види је тзв. проблем фермионских минуса. Поменути проблем такође се види и у нумеричким симулацијама, где се мора применити неки додатни физички увид да би алгоритам конвергирао. Један од непертурбативних приступа оваквим проблемима је AdS/CFT (анти де Ситер/конформна) кореспонденција. Ту је идеја да се примени дуалност између конформних (квантних критичних) система и квазикласичне гравитације у просторвремену са одређеном геометријом. Пошто је у питању S-дуалност (слаба/јака), јако корелисани проблем своди се на слабо купловну гравитацију. Тако с једне стране проблем постаје приступачнији, а с друге стране добијамо мост између две области (квантне теорије поља на коначној густини и квазикласичне гравитације).

Ту постоји неколико тема које смо отворили. Детаљно смо испитали модел настанка чудног метала из Фермијеве течности, али су остала још нека питања. Док је понашање на коначној температури углавном јасно [M. Čubrović, J. Zaanen, K. Schalm, Science **325**, 439 (2009); M. V. Medvedyeva, E. Gubankova, M. Čubrović, K. Schalm and J. Zaanen, JHEP **2013**, 25 (2013)], остало је да се боље разуме квантна критична тачка, на нултој температури, где се види фазни прелаз бексоначног реда (ВКТ прелаз), но треба

идентификовати ексцитације које доводе до таквог исхода и описати одговарајућу метрику у самој квантној критичној тачки. Такође смо утврдили да конвенционални антиферромагнетни фазни прелаз (кондензација параметра поретка) може довести до деконфинирања, што одговара прелазу из нормалног метала у фракционализовани, који нарушава Латинцерову теорему [M. Šubrović, JHEP **2016**, 102 (2016)]. Очигледна је веза са тешким фермионима, али остаје да се провере ефекти решетке, јер смо до сада вршили прорачуне само у континууму. Такође се бавимо Бозе-Ферми мешавинама и ефективном Лоренцовом инваријантношћу која се види у таквим системима у одређеним случајевима.

Важно ново питање је могућност везе између Хабардовог модела и AdS/CFT кореспонденције. Хабардов модел доста добро описује низ појава: антиферромагнетизам, не-Фермијеве течности, Мотове изолаторе. У оквиру теорије динамичког средњег поља (DMFT) за Хабардов модел, прелаз из метала у изолатор је детаљно проучен и нађени су остаци квантне критичности на коначној температури [J. Vučićević, D. Tanasković, M. J. Rozenberg and V. Dobrosavljević, Phys. Rev. Lett. **114**, 246402 (2015)]. Сада је изазов да се да комплементарни поглед из одговарајућег дуалног гравитационог система, тим пре што DMFT даје индикације да збиља постоји универзално понашање које се протеже све до високих температура [J. Vučićević, H. Terletska, D. Tanasković and V. Dobrosavljević, Phys. Rev. B **88**, 075143 (2013)], а што је управо и типична ситуација у AdS/CFT моделима.

Поред тога, разни други видови универзалности су уочени у неуређеним јако корелисаним системима у близини Мотовог фазног прелазу, који нам омогућавају разумевање наизглед потпуно другачијих система, као разређених дводимензионалних електронских гасова и МОСФЕТ-а за које још увек не постоји микроскопска теорија [M. M. Radonjić, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, K. Haule, and G. Kotliar, Phys. Rev. B **85**, 085133 (2012)].

Ту се постављају и методолошка питања: може ли се искористити дуалност са (1+1)-Лавлоковом гравитацијом, да се реши проблем ефективног (0+1)-димензионог модела кластера нечистоћа који је саставни део DMFT решења за Хабардов модел? Проблем фермионских минуса представља ограничење и за DMFT, те у најинтересантнијим режимима параметара (ниска температура, коначан допинг) није могуће исконвергирати егзактно решење. Чак и тамо где се проблем фермионског знака не испољава, решење постаје веома нумерички захтевно, па је даља оптимизација алгоритама за решење модела ефективних нечистоћа од круцијалног значаја.

Тема 3.2: Квантна критичност и транспорт у неравнотежним системима

Системи наведени у претходној тачки могу се проучавати и у динамичком режиму, тј. може се поставити питање њихове еволуције у времену. Типичан сценарио је тзв. квенч, у коме се неки параметар система (нпр. температура, хемијски потенцијал, електромагнетно поље, итд) мења променом спољашњих услова. Под одређеним условима систем достиже ново равнотежно стање после довољно дуго времена, при чему је еволуција у току преласка из почетног у ново стање занимљива и кључно зависи од симетрија и степени слободе система. Овде се ситуација још више компликује у односу на равнотежне проблеме (претходна тачка) па не само јако интерагујући већ и слабо купловани, па и неинтерагујући системи представљају изазов. Потребно је дакле развити посебне стратегије за режим јаких и за режим слабих интеракција.

Специјалан случај од интереса представља термални квенч, где систем на нултој температури доводимо у контакт са термостатом, саопштавајући му (по достизању равнотеже) коначну температуру. И овде је главни изазов прелазни режим, тј. процес

термализације, чија брзина зависи не само од брзине интеракција него и од степена сплетености стања.

Изучавање неравнотежних процеса може бити од користи и за разумевање равнотежних стања. Последњих година, у литератури се често разматра квантно-критични режим (тј. чудни метал), у терминима динамике флуида. Отворено је питање природе транспорта у том режиму, и могуће постојање ефективних константи дифузије, вискозности, па чак и присуство турбулентних токова. Рачунање ових особина по дефиницији у микроскопском моделу, превазилази оквире теорије линеарног одзива и захтева директно посматрање транзитних стања. На пример, начин да се испита да ли чудни метал одговара дифузном режиму, било би да се крене из неуниформног почетног стања и посматра како замиру струје и градијенти густине. Иако служи за изучавање равнотежног стања, ова калкулација формално спада у квенчеве.

Конвенционални приступ неравнотежним проблемима је Каданов-Бајмов формализам (Швингер-Келдишов метод за специјални случај стационарних стања или нулту температуру). DMFT се праволинијски уопштава у овом формализму, али проблем ефективне нечистоће постаје још компликованији – осим фермионског проблема знака, појављује се и динамички проблем знака. Стога се неравнотежне DMFT калкулације често врше са додатним апроксимацијама (нпр. теорија итеративне пертурбације, IPT). Даљи искорак у методологији је овде неопходан да се да финални одговор на питања од интереса.

Формализам динамике термалних поља (TFD) показао се као један од најробуснијих приступа у неравнотежној теорији поља. Идеја је да се уведу термални дублети, тј. да се разматра удвојени простор стања, чији базис чине парови у којима прва компонента еволуира у времену унапред, а друга уназад. На тај начин могу се изразити дисипативна стања и размена енергије са термостатом, па можемо проучавати термализацију (нисмо осуђени на одређену временску контуру као у формализму Швингера-Келдиша). Наш главни циљ је да проблем термализације сведемо на фамилијарнији формализам равнотежне квантне критичности, што се да учинити ако одинтегралимо другу компоненту дублета и уведемо ефективно калибрационо поље. Физички смисао ексцитација овог поља (које има $SU(1,1)$ симетрију) је да су у питању кохерентна стања термалне струје. Сада термализација постаје нарушење симетрије дублета, тј. нарушење ефективне калибрационе симетрије, и може се формално представити као хигсовање термалне струје, те временску динамику добијамо решавањем квазикласичних једначина, а експоненти скалирања добијају се слично као у равнотежној теорији Ландау-Гинзбурга. За сада смо се у овом правцу занимали само експлицитно решивим $(1+1)$ -димензионим системима, где се ТФД своди на Линдбладову једначину, а линдбладијан се у неким случајевима може аналитички дијагонализовати [M. V. Medvedyeva, M. T. Šubrović and S. Kehrein, Phys. Rev. B **91**, 205416 (2015)]. Остаје да се размотре проблеми у више димензија, где више нема интегралности. Чак и код квенча у неинтерагујућем систему ствари нису јасне, а додавање слабе интеркације на пертурбативни начин сасвим би задовољило.

Са јако интерагујуће стране остаје нам AdS/CFT. Готово све што је овде рађено заснива се на Ваидја метрици, слободно падајућој бесконачно танкој опни праšине која колапсира у црну рупу. Ово одговара термалном квенчу у конформно инваријантном систему максималне симетрије, па и не изненађује готово тренутна термализација. Нас интересују физички релевантнији сценарији, са мање симетрије. Један логичан правац је динамичка верзија фазног прелаза поменутог у претходној тачки (из фракционализованог система у Фермијеву течност), тј. експлозија црне рупе у електронску звезду приликом квенча температуре или хемијског потенцијала. Други

модел је квенч поља у холографском суперпроводнику. Овде нам ваља развити и довољно ефикасан нумерички алгоритам за нестационарне проблеме у AdS простору. По свему судећи шема другог реда сасвим одговара, али треба бити пажљив у адаптацији корака у радијалном правцу, јер ту, због AdS метрике, постоји промена скале за много редова величине између почетне и крајње границе интеграције.

Тема 3.3: Фундаментална питања AdS/CFT кореспонденције

Иако традиционално у истраживањима на граници ниско- и високоенергетске физике ова потоња даје нове формализме, а она прва их примењује, у неким питањима овај однос може се и обрнути. Ово се односи пре свега на питање колико је холографски принцип општи и независан од детаља теорије струна типа IIB у оквиру које је првобитно реализована AdS/CFT кореспонденција. Идеја је да се искористи чињеница да динамика дуж радијалне (додатне) димензије у AdS простору одговара току ренормализационе групе (RG) за дуалну теорију поља. Недавни резултати Санг-Сик Лија указују да се у неким случајевима, полазећи од матричног $O(N)$ модела и његовог RG тока, може конструисати дифеоморфно инваријатна теорија гравитације у AdS простору. Међутим, сви познати резултати су на нултој температури, а најдубљи проблем је управо каква је веза хоризонта црне рупе на коначној температури и термалних стања у теорији поља. Стога нам ваља написати $O(N)$ или Ландау-Гинзбургову теорију на коначној температури и експлицитно конструисати RG ток који задовољава дифеоморфну инваријантност. Претпоставка је да ће резултујући систем описати хоризонт црне рупе, у Хамилтоновим променљивим (истек и помак, енг. lapse and shift variables), које су неизбежне јер имамо преферирани правац (радијални), а који добија улогу канонског времена. И претходно поменути проблеми у којима постоји позадинска (јонска) решетка, као што смо напоменули, могу бити полазна тачка за радикалније новине у AdS/CFT формализму.

Потпројекат 4: Транспорт наелектрисања, суперпроводност и динамика решетке у јако корелисаним материјалима

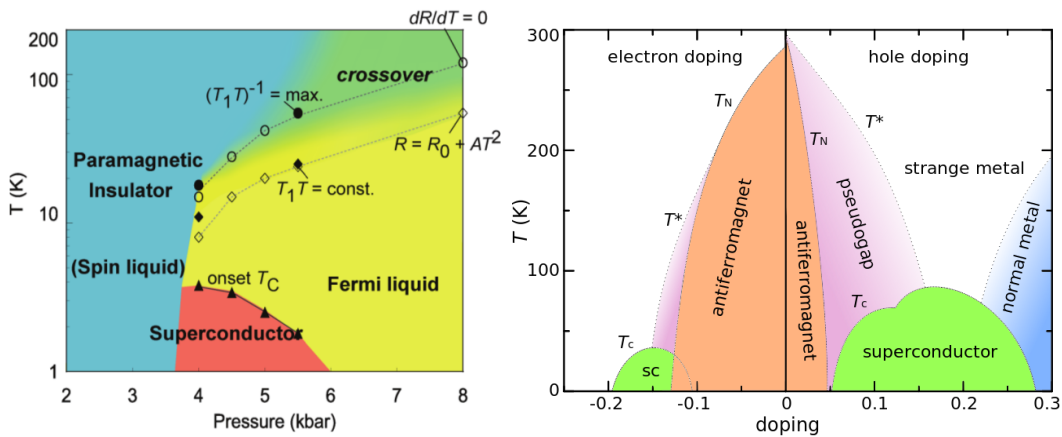
Руководилац: др Јакша Вучичевић

Учесници: др Јакша Вучичевић, др Милош Радоњић, др Дарко Танасковић

Студенти докторских студија: Willem-Victor van Gerven Oei (ментор Др Дарко Танасковић), а очекује се ангажман нових докторанада

Највећи број материјала може се описати конвенционалном теоријом енергетских зона, и може се сврстати или у Ферми течности или зонске изолаторе. Чак се и многи суперпроводници могу описати ефективном зонском теоријом Бардин-Купер-Шифер (BCS), на бази декупловања електрон-фонон интеракције методом средњег поља. Теорија функционала густине (DFT) за многе од ових материјала даје квантитативне предикције и за отпорност и висину критичне температуре за суперпроводност, као и фононски спектар решетке.

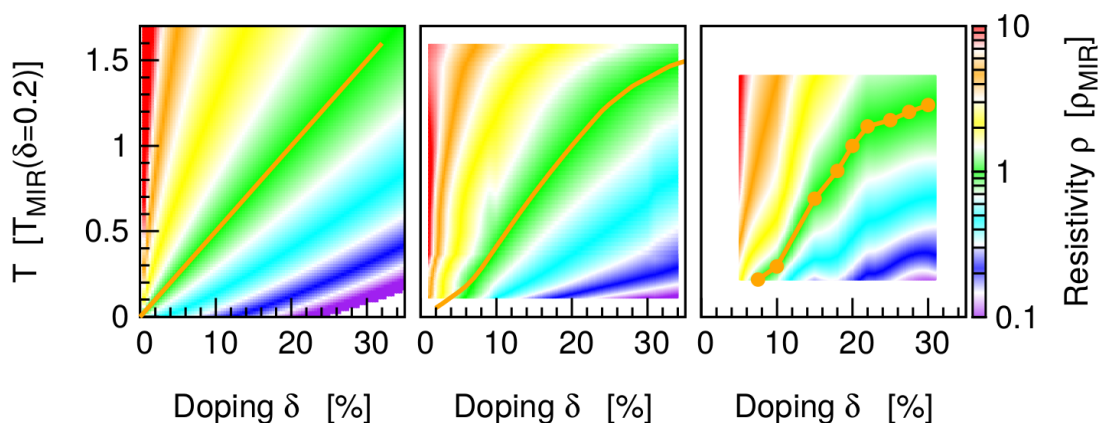
Када се материјали опиру оваквом једноставном опису, то се често доводи у везу са повећаним значајем међу-електронске (екраниране Кулонове) интеракције, која онда више не може да се третира на нивоу средњег поља. У често проучаване примере оваквих јако-корелисаних материјала спадају једињења купрата (нпр. $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}$) и капа-органици. Ови материјали постоје у различитим фазама, као што су: Мотов изолатор, високотемпературни (неконвенционални) суперпроводник, антиферомагнет, лош (чудни) метал и спинска течност. Ово је илустровано на слици 4.1.



Слика 4.1: Генерички фазни дијаграм капа-органика (лево) и купрата (десно).

За опис ових фаза материје, минимални модел је Хабардов модел. Хабардов модел своди микроскопски модел кристалне решетке на бенд валентних електрона који скакућу између дискретних локализованих орбитала у простору, и интерагују одбојно само када се нађу на истој орбитали. У решавању Хабардовог модела, за сада је најуспешнија теорија динамичког средњег поља (DMFT). Овај метод има јасно дефинисан контролни параметар, чијим се варирањем могу и у пракси исконвергирати нумерички егзактна решења. У комбинацији са DFT методом, DMFT се може користити и за решење реалистичнијих више-орбиталних модела, често и са сложенијим ефективним интеракцијама (Слејтер или Канамори, насупротив дијагоналне густина-густина Хабард интеракције).

Разна уопштења DMFT су у последњих три декаде допринела разумевању фазних дијаграма многих материјала. Поготову је важан допринос разумевању купратних једињења као примарних кандидата за суперпроводник на собној температури (тренутни максимум 134 K). DMFT решења Хабардовог модела дају квалитативну слику која јасно одговара експерименту, што је илустровано на слици 4.2. Међутим, још увек недостаје јасна прескрипција да се критична температура за суперпроводност у овим материјалима учини још вишом.



Слика 4.2: DMFT квалитативно описује проводност купрата на температурама 300-1000 K. Десни панел: експеримент са једињењем LSCO. Средњи панел: DMFT резултат. Леви панел: феноменолошка теорија која доводи у везу високотемпературни режим са постојањем кванте критичне тачке на нултој температури.

Последњих година такође пажњу привлаче Хојслерови материјали. Сачињени од прелазних метала и врло специфичне структуре, испољавају разна магнетна уређења, изражену магнетоотпорност, полуметаличност, полупроводност (са могућношћу

спинске филтрације), суперпроводност и тополошку изолаторску фазу. Због ових особина, они су врло погодни за примене у спинтроници, али је и за њихов теоријски опис и пуно разумевање потребно урачунати јаке електронске корелације. Поврх тога, ови материјали се примењују у неравнотежним режимима, што додатно компликује теоријски опис. Неравнотежни DMFT + DFT метод је водећа алатка за моделирање ових система.

Главни циљ овог потпројекта биће разумевање особина јако корелисаних материјала, првенствено купрата, капа-органика и Хојслерових материјала. Истраживања у оквиру овог потпројекта представљаће основу за докторски рад Willem-Victor van Gerven Oei-a.

Истраживачки рад ће се одвијати у оквиру следећих тема:

Тема 4.1: Методолошка унапређења DMFT теорије

У оквиру ове теме, радићемо на следећим задацима:

- формулација теорије помоћу функционала корелационих функција вишег реда (TRILEX, QUADRILEX)
- оптимизација квантног Монте-Карло алгоритама за нумеричко решење модела ефективног кластера нечистоћа (солвера), који је централни део DMFT метода
- оптимизација методе којом се интерполира између оригиналне DMFT теорије (број чворова решетке $N_c=1$) и егзактног лимита (N_c бесконачно). Сви досадашњи приступи (целуларни приступ, приступ динамичког кластера и приступ угњеждених кластера) имају извесна ограничења
- развој солвера за вишеорбитални проблем нечистоће у неравнотежном, али стационарном режиму (steady state).

Тема 4.2: Оптимизација параметара Хабард модела у односу на критичну температуру за суперпроводност

Досадашње калкулације су показале да детаљи Хабардовог модела могу утицати на суперпроводне особине. Потребно је утврдити оптималне параметре Хабардовог модела за суперпроводност у оквиру што егзактније калкулације, а онда разумети како се то односи на експериментално оствариве материјале.

Тема 4.3: Проналажење уопштења Хабардовог модела које највише доприноси критичној температури за суперпроводност

Физичка слика која произлази из досадашњих калкулација је да су за високотемпературну суперпроводност неопходне јаке корелације, али да је зато она у конкуренцији и са Мотовим изолатором и псеудо-гап фазом. Од примарног је значаја разумети на који начин је могуће потиснути Мотов изолатор у режиму јаке интеракције и полупопуњености орбитала, како би се ослободио простор за суперпроводност. Тренутно, суперпроводност се у купратима постиже допирањем, али се на тај начин уништавају и антиферромагнетне корелације које погодују суперпроводности. Потребно је наћи начин да се супресује Мот изолатор без нарушења полупуњености орбитала и у присуству антиферромагнетних корелација (или чак антиферромагнетног уређења).

Тема 4.4: Разумевање транспортних особина лошег метала

Разумевање транспортних особина лошег метала. Било какво повишење критичне температуре за суперпроводност остварило би се на рачун режима лошег метала. Зато је од примарног значаја разумети ову фазу. Досадашње калкулације су указале на могућу универзалност понашања јако корелисаних система на високој температури, те на

могућу везу између лош метал режима у купратима и капа-органицима. Раздвајање универзалног понашања од понашања специфичног за материјал је круцијално у тражењу кандидата за високотемпературну суперпроводност.

Тема 4.5: Ефекти фонона и електрон-фонон интеракције у јако-корелисаним системима

Присуство високофреквентних фонона је кључно за конвенционалну суперпроводност, али њихово могуће учешће у механизму високотемпературне суперпроводности је отворено питање. У сарадњи са експерименталном групом за Раманову спектроскопију ћемо истраживати динамику решетке разних суперпроводника на бази гвожђа, као и Диракове метале попут CaMnBi_2 .

Тема 4.6: Разумевање неравнотежних стања јако-корелисаних материјала

За употребу јако-корелисаних материјала у спинтроници, потребно је разумети њихове особине у неравнотежном режиму и у геометрији хетеро-структура и интерфејса. Бавићемо се проблемом електронског и спинског транспорта кроз ове системе са фокусом на улогу међуелектронских интеракција. Посебно ћемо израчунати својства квантног транспорта кроз полу-металне (ХМ) системе као што су Хојслерова једињења, укључујући недавно откривене тополошке Хојслер материјале и друге органо-металне материјале.

Тема 4.7: Разумевање мулти-орбиталних ефеката и ефеката кристалне структуре у реалним системима

За квантитативне предикције термодинамичких и транспортних особина обично је потребно урачунати детаљну електронску структуру. Ефекте јаке електрон-електрон интеракције је могуће урачунати помоћу ДМФТ+ДФТ метода, који ћемо да применимо на различита једињења структуре перовскита, посебно на рутенате. Тадаће, помоћу неравнотежног солвера који ћемо развити у оквиру овог пројекта и постојећих транспортних пакета за неравнотежне системе заснованих на теорији функционала густине (ДФТ), моћи ћемо да решимо одговарајуће ДМФТ једначине за моделне системе, као и да опишемо реалистичне материјале у неравнотежној поставци.

Потпројекат 5: Електронске особине полупроводничких материјала

Руководилац: др Ненад Вукмировић

Учесници: др Ненад Вукмировић, др Марко Младеновић, др Никола Продановић

Студенти докторских студија: Вељко Јанковић (ментор др Ненад Вукмировић), Милан Јоцић (ментор др Ненад Вукмировић)

Карактеристике свих електронских и оптоелектронских направа су одређене процесом транспорта наелектрисања кроз полупроводнички материјал. На пример, функционисање соларних ћелија је засновано на процесу апсорпције светлости у полупроводничком материјалу и претварању фотона у покретне носиоце који производе струју. У транзисторима са ефектом поља, покретљивост носилаца у каналу транзистора директно одређује максималну фреквенцију на којој може да ради направа. У наведеним случајевима носиоци наелектрисања (електрони или шупљине) интерагују са осцилацијама решетке материјала – фононима. Ова интеракција зато дефинише мерљиве транспортне особине, као што су проводност материјала, струјно-напонска карактеристика направе или ефикасност конверзије светлосне у електричну енергију соларне ћелије. И поред тога што је веома битно да се предвиде и разумеју транспортне

особине материјала, још увек не постоје лако применљиви методи да се конструишу Хамилтонијани који су релевантни за реалне материјале, ни методи да се реши транспортни проблем ових Хамилтонијана. На пример, тек недавно је израчуната коришћењем квантних Монте Карло метода покретљивост носилаца у најједноставнијем моделу интерагујућих електрона и фонона на решеци – Холштајновом моделу [Mishchenko et al., Phys. Rev. Lett. **114**, 146401 (2015)] Поуздан метод за прорачун константи електрон-фонон интеракције у поларним неорганским полупроводницима, као што је GaAs, је такође тек недавно развијен [Verdi et al., Phys. Rev. Lett. **115**, 176401 (2015)].

У оквиру овог потпројекта, истраживаћемо полупроводничке материјале који су од највећег значаја за технолошке примене: органске полупроводнике, хибридне органско-неорганске полупроводнике на бази халидних перовскита и поларне неорганске полупроводнике. Разматраћемо процесе транспорта наелектрисања са циљем да опишемо опсервабилне физичке величине као што су покретљивост носилаца у материјалу и вероватноћа раздвајања електрона и шупљине на граници два материјала. С једне стране, радићемо на даљем развоју и примени метода за прорачун електронске структуре [Mladenović et al., Adv. Funct. Mater. **25**, 1915 (2015)] и за прорачун параметара електрон-фонон интеракције [Vukmirović et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 126407 (2012)] које смо развили у прошлости. С друге стране, развијаћемо ефикасне методе за поуздан прорачун равнотежне покретљивости и временске динамике за једноставније моделне Хамилтонијане. У каснијим фазама пројекта ови методи ће онда бити примењивани на реалне материјале и направе што ће нам омогућити да предвидимо мерљиве транспортне особине материјала. Истраживања у оквиру овог потпројекта представљаће основу за докторске радове Вељка Јанковића и Милана Јоцића.

Истраживање ће бити обављено у оквиру следећих тема:

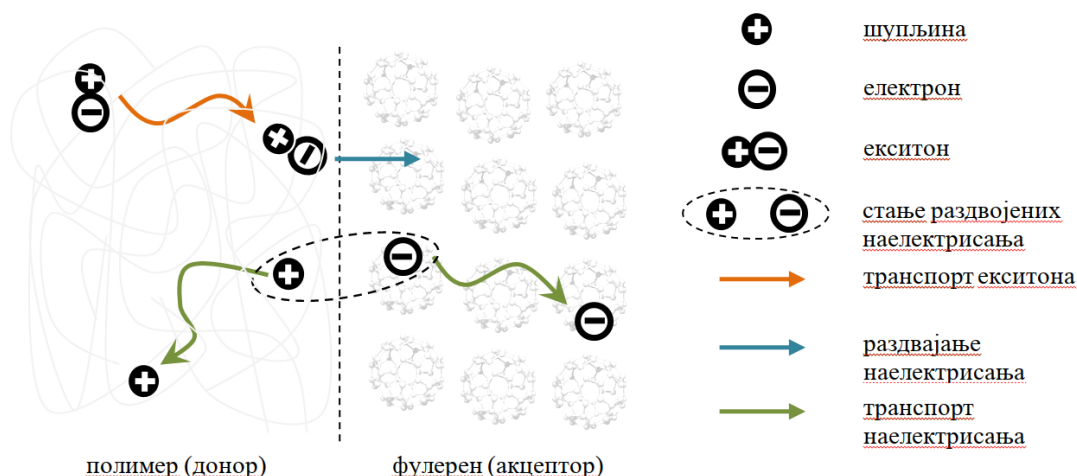
Тема 5.1: Равнотежни електронски транспорт у системима са значајном електрон-фонон интеракцијом

У многим реалним системима, интеракција електрона са фононима није слаба и не може се третирати као пертурбација. Примери таквих система су органски молекуларни кристали и јако поларни неоргански кристали. Радићемо на развоју теорије чији је циљ да опише покретљивост носилаца у оваквим системима за произвољну вредност јачине електрон-фонон интеракције. Теорија је базирана на унитарној трансформацији Хамилтонијана којом се добија нови Хамилтонијан који се састоји од дела који описује неинтерагујуће полароне, дела са фононима и дела са поларон-фонон интеракцијом која се може третирати пертурбативно. Теорија ће бити најпре примењена на неке стандардне Хамилтонијане, као што су Холштајнов, Фролихов и Пајерлсов, и упоређена са резултатима софистициранијих метода, као што је квантни Монте Карло. Прве резултате за случај Фролиховог Хамилтонијана смо недавно добили [Kornjača et al., Ann. Phys. **391**, 183 (2018)]. Затим ће цео приступ бити примењен да се идентификују транспортни режими и израчуна покретљивост носилаца у реалним материјалима као што су органски кристали, низови квантних тачака и јако поларни неоргански кристали.

Тема 5.2: Неравнотежна динамика екситона у органским полупроводницима

Наставићемо наша истраживања динамике раздвајања екситона на граници два органска полупроводника. Наши претходни резултати [Janković et al., Phys. Rev. B **95**, 075308 (2017)] су дали значајан допринос разумевању ових процеса. Наиме, показано је да на временској скали реда пикосекунде, већина екситона која се генерише под дејством светлости у донору (слика 5.1) ту и остаје. Највећи број просторно раздвојених екситона који су присутни неколико стотина фемтосекунди након екситације заправо настаје

директном фотоекситацијом, а не претварањем екситона у донору у просторно раздвојене екситоне. Остало је отворено питање шта доводи до велике ефикасност конверзије донорских екситона у раздвојена наелектрисања.



Слика 5.1: Шематски приказ физичких процеса на граници два полупроводника.

Да бисмо одговорили на то питање, развићемо модел који ће моћи да опише систем и на дужим временским скалама. Користићемо и даље једнодимензионални Хамилтонијан развијен у нашем претходном истраживању, али ћемо динамику разматрати у оквиру семикласичног приступа. У овом приступу сматраћемо да се екситонска динамика одвија прелазима између различитих екситонских стања која постоје на граници, а да ти прелазни настају услед интеракције екситона са фононима.

Тема 5.3: Електронске особине хибридних органско/неорганских перовскитних полупроводника

У последњих неколико година, хибридни органско/неоргански перовскитни полупроводници су доспели у жижу интересовања због велике ефикасности соларних ћелија на бази њих и могућности њихове јефтине производње. С обзиром да су у питању нови материјали, јако мало се зна о њиховим основним особинама. Пошто се на атомском нивоу ови материјали састоје од органских молекула који се налазе унутар неорганске матрице, основно питање које се поставља је да ли су њихове особине више налик на органске или неорганске материјале. Да бисмо то утврдили, испитиваћемо најпре ефекте динамичке неуређености на њихову електронску структуру коришћењем методе молекуларне динамике из првих принципа. Две групе симулација ће бити извршене – једна у којој сви атоми могу да се крећу и друга у којој је неоргански део непокретан. У даљим фазама пројекта планирамо детаљно истраживање наноструктура базираних на овим материјалима и развој модела за прорачун покретљивости у материјалу, при чему ће избор метода које ће бити коришћене умногоме зависити од претходних резултата.

Потпројекат 6: Оператор времена у квантној механици и квантној теорији поља

Руководилац: др Слободан Првановић

Учесници: др Слободан Првановић, др Александар Белић

Студенти докторских студија: очекује се ангажман нових докторанада

У оквиру овог потпројекта биће разматран формализам ауто-адјунгованих оператора времена и енергије, као и њихова примена у случајевима као што су радиоактивни

распад, тунелирање кроз потенцијалну баријеру, моделирање убрзано ширећег универзума или ЕПР проблем. Биће разматрана и могућност тзв. комплексификације оператора координате и импулса, као и осталих генератора симетрије, што ће омогућити анализу појаве негативних енергија у формализму. Биће разматрана тзв. стрела времена и повезаност неповратности времена и ненегативности вероватноће, као и могућност дефинисања квантне механике за појединачне системе. Оператори времена и енергије биће разматрани и у квантној теорији поља, а са циљем успостављања везе са АДМ формулације теорије релативности и анализе тзв. ЦПТ инваријантности. Биће разматрана и могућност експерименталне провере постојања интерференције временског типа.

Тема 6.1: Развој формализма

У оквиру ове теме ћемо развијати и применити оригинално уведени формализам оператора времена, где је он ауто-адјунговани оператор, конјугован оператору енергије. Како ова два оператора делују у посебном Хилбертовом простору, отвара се могућност за увођење нове једначине, која је аналогна Шредингеровој једначини, али са замењеним улогама времена и енергије, односно Хамилтонијана и динамичког аналога времена. Постојање могућности за уопштавање Шредингерове једначине може бити искоришћено за разматрање временски зависних Хамилтонијана и налажење и анализирање решења Шредингерове једначине за овакве случајеве.

Тема 6.2: Примене на радиоактивни распад, квантно тунелирање и ЕПР проблем

Формализам оператора времена може бити примењен и на третирање радиоактивног распада, односно његовог формалног описа, као варијанте канонског ансамбла. Прецизније, тзв. експоненцијални закон радиоактивног распада може бити идентификован са дистрибуцијом вероватноће по стањима, а која дефинише канонски ансамбл, при чему су стања у овом случају својствена стања оператора који представља динамички аналогон оператора времена.

Формализам оператора времена може се применити и на анализу могућности квантног тунелирања кроз потенцијалну баријеру временског типа, односно баријеру која зависи искључиво од времена. Ту се могу анализирати појаве имагинарних вредности када се оператор импулса примени на решења Шредингерове једначине. Ова појава имагинрних вредности при дејству ауто адјунгованих оператора, а која је већ разматрана у литератури, може се третирати на потпуно нови начин путем тзв. комплексификације оператора који су генератори симетрије, а пре свега оператора координате и импулса. Зато ће бити разматране особине анти ауто адјунгованих оператора. Биће разматран Хамилтонијан хармонијског осцилатора, али са анти ауто адјунгованим операторима координате и импулса уместо стандардних ауто адјунгованих оператора, спектар овог Хамилтонијана и могућност увођења тзв. оператора повишавања и снижавања (креационог и анихилационог оператора), а затим ће се добијени формализам применити на моделирање убрзано ширећег универзума.

Формализам оператора времена биће примењен и на разматрање ЕПР проблема. Постојање новоуведеног формализма омогућава детаљнији опис акта мерења у квантној механици, а што ће бити искоришћено за нови приступ ЕПР проблему. Овде ће од значаја бити то што је, за разлику од координата, време једниствено у том смислу да, без обзира колико се система заједнички разматра и без обзира колико они независних степени слободе они имају, постоји само једно време за све њих.

Тема 6.3: Оператор времена у теорији поља

Оператор времена ће бити уведен и у теорију поља. Ту ће, пре свега, бити разматрана тзв. релација микро каузалности у случају постојања оператора времена у формализму. С обзиром на то да оператори времена и енергије делују у Хилбертовом простору који је одвојен од Хилбертовог простора где делују оператори координате и импулса, биће разматране последице које може да има увођење ових оператора на тзв. ЦПТ инваријантност. Ову анализу је неопходно спровести у контексту чињенице да оператор енергије, за разлику од Хамилтонијана, нема ограничен спектар. Примена формализма оператора времена биће настављена у правцу повезивања са АДМ формулацијом теорије релативности, где је формализам параметарске инваријантности примењен на тражење независних степени слободе у случају гравитације, тј. у теорији релативности.

Тема 6.4: Феноменолошко време и интерференција временског типа

Посебан проблем који ће бити анализиран је везан за то да време може да тече само у једном правцу. Неповратност тзв. феноменолошког времена, која је повезана са тиме да ентропија може само да расте или остане иста, биће искоришћена за разматрање могућности формулисања квантне механике појединачних система, односно задавања формалног описа који важи за појединачне системе, а не само за ансамбле.

Ради провере могућности тога да се два тренутка времена нађу у суперпозицији, односно провере могућности постојања интерференције временског типа, биће разматран експеримент у коме би се генерисало стварање фотона у суперпозицији два различита тренутка времена. Тада фотон не би био створен у једном ранијем или једном каснијем тренутку, већ у суперпозицији таква два тренутка, а што би се накнадно манифестовало појављивањем интерференционе слике на екрану, слично као у стандардном интерференционом експерименту, али са потпуно другачијим узроком настанка интерференције. За разлику од стандардног случаја, где интерференција настаје услед тога што се фотон налази на два различита места, овде би до интерференције долазило због тога што фотон настаје у два различита тренутка времена.

Потпројекат 7: Нумеричко моделирање транспорта кроз хетерогене средине

Руководилац: др Слободан Врховац

Учесници: др Слободан Врховац, др Зорица Јакшић, др Јулија Шћепановић

Студенти докторских студија: Даница Стојиљковић (ментор др Слободан Врховац)

Хетерогеност у општем случају представља разноврсност структурних конституената система. Хетерогени материјали састоје се од домена које образују различите супстанције или их чини само једна супстанција која се налази у различитим фазама. При томе се претпоставља да је величина домена много већа од димензија молекула, али је много мања од карактеристичне дужине макроскопског узорка. Природни хетерогени материјали су, на пример, поликристали, земљиште, стене, грануларни материјали, дрво, кости, цитоплазма, крв, биљна и животињска ткива, тумори, итд. Вештачки хетерогени материјали обухватају композите, колоиде, гелове, пене, прашкове, микроемулзије, бетон, итд. Физички феномени који су од интереса одигравају се на микроскопским скалама дужина које могу да се крећу од десетак нанометара у случају гелова, до метарских скала у случају геолошких средина. Проучавање транспортних, електромагнетних и механичких својстава хетерогених материјала има мултидисциплинарни карактер због коришћених метода које потичу из различитих

научних области, као што је физика материјала, стохастичка геометрија, статистичка механика, геофизика и биологија.

Основни задатак нашег потпројекта биће проучавање процеса дифузије честица кроз хетерогене системе. Нумеричко моделовање транспортних процеса представљаће доминантан метод који ће се примењивати у овим истраживањима. Процеси који ће бити моделовани су субдифузивни транспорт честица кроз закрчене средине (crowded media) и процес гелирања. Са овим процесима су тесно повезане перколационе карактеристике наведених система. Због тога ће бити посебно проучавана перколациона својства процеса депозиције на супстрату на коме су хетерогености генерисане као примесе разних облика и величина. Осим тога, један од задатака биће развој модела типа ловац-плен (predator-prey) који има сложену геометрију простора у коме се крећу аутономни агенти. Биће анализирана динамика ловац-плен модела у коме се кретање агената одиграва у простору у коме постоје препреке које ограничавају њихово кретање.

Важно је напоменути да све претходно наведене хетерогене системе који ће бити проучавани повезује могућност јединственог моделовања као дифузивног гаса објеката депонованих на квадратној или триангуларној решетки. При томе, сваком проучаваном систему одговарају специфична правила кретања и интеракције објеката. Међутим, у свим моделима хетерогености се генеришу на исти начин - предепоновањем одговарајућих објеката до унапред задате густине. Такође, за све наведене моделе критичне вредности релевантних параметара (нпр. тачка сол-гел прелаза, прелаз са субдифузивног на локализовани транспорт) могуће је довести у везу са перколационим својствима предепонованих објеката (препрека). Истраживања у оквиру овог потпројекта представљаће основу за докторски рад Данице Стојиљковић.

У оквиру потпројекта биће реализоване следеће истраживачке теме:

Тема 7.1: Транспорт честица кроз закрчене средине (crowded media)

Моделовање транспорта кроз закрчене средине (crowded media) је од значаја за схватање кретања протеина кроз ћелијску цитоплазму, транспорт честица кроз нанокмполитне материјале и гелове, или најопштије, за предикцију кретања индивидуа кроз веома густе колективе. У већини постојећих модела препреке су генерисане процесом случајног депоновања дискова (2D) или сфера (3D) на континуалном супстрату до унапред задате густине. У веома малом броју истраживања као препреке су коришћени несферични објекти, односно објекти ниже симетрије. Ми ћемо анализирати дифузију честица роја које се крећу у простору између макроскопских објеката (препрека) који у значајној мери просторно ометају слободну дифузију роја. Дифузија честица роја биће моделована на триангуларној решетки, при чему ће препреке бити генерисане као предепоновани објекти разних величина и облика. Могућност коришћења великог броја објеката различитог облика ће омогућити успостављање везе између микро-структурних својстава средине и динамике транспорта честица роја. Један од циљева је довођење у везу субдифузивног карактера транспорта честица и перколационих својстава предепонованих објеката-препрека. У случајевима када су објекти-препреке јако анизотропни, биће анализиран утицај њихове орјентационе уређености на дифузиона својства система.

Тема 7.2: Динамичке хетерогености меких стакластих материјала

У оквиру ове теме биће изучавана комплексна динамика хетерогених материјала као што су порозни материјали, стакласти системи и грануларни материјали. У ту сврху биће коришћене нумеричке симулације моделних гасова на дво-димензионалним решеткама који су базирани на концепту геометријске фрустрације. Један од циљева је боље

разумевање феномена аномалне дифузије у системима као што су микро-порозни материјали и супер-охлађене течности. Модел субдифузивног гаса биће реализован на триангуларној решетки, при чему ће се посебно анализирати утицаји трансляторних и ротационих степени слободе честица на транспортна својства система. Честице (објекти) могу бити сложене самонепресецајуће шетње на триангуларној решетки. Тиме ће бити омогућена анализа утицаја величине и симетрије објеката на субдифузивни транспорт. Посебна пажња биће посвећена перколационим својствима модела случајне секвенцијалне адсорпције сложених објеката на триангуларној решетки са циљем да она буду доведена у везу са субдифузивном динамиком моделног гаса на решетки.

Један од циљева је изучавање динамичких хетерогености гелова у оквирима флукуација функције расејања. Процес гелирања биће моделован као перколациони прелаз субдифузивног гаса комплексних објеката на триангуларној решетки. Биће анализирана временска зависност динамичке суспензибилности субдифузивног гаса на триангуларној решетки. Очекује се да суспензибилност система расте у току времена достижући плато. Висина платоа, за случај малих таласних вектора, поклапа се са средњом величином кластера у систему и зато дивергира када се густина система приближава перколационом прагу (тачка сол-гел прелаза). Другим речима, асимптотску вредност суспензибилности могуће је повезати са дистрибуцијом кластера у систему. Због тога се суспензибилност може идентификовати као термодинамичка опсервабла која је повезана са својствима кластера у систему који гелира на перколационом прагу. Значај оваквог приступа је у томе што мерењем флукуација корелационе функције расејања могу бити одређени критични експоненти без директних механичких контаката са узорком. Осим тога, детаљно ће бити анализиран утицај облика честица сол-фазе на процес гелирања.

Тема 7.3: Перколације на хетерогеним супстратима

Перколациона својства процеса случајне секвенцијалне депозиције на хетерогеном супстрату биће проучавана у случају када хетерогености генеришу примесе разних облика и величина. На такав супстрат се врши случајна секвенцијална адсорпција сложених објеката који су самонепресецајуће шетње на триангуларној решетки. У моделу се за разне депоноване објекте анализира зависност границе загушења и перколационог прага од густине и облика примесе на решетки. Следећи корак у развоју модела биће случајеви када примесе нису више објекти једне врсте, већ смеше објеката разних облика и величина.

Тема 7.4: Ловац-плен (predator – prey) модели

У општем случају ловац-плен модел (у даљем тексту Л-П модел) се састоји из: (а) честица (аутономних агената – индивидуалних или колективних ентитета) чији утицај на систем у целини проучавамо; (б) правила одлучивања при њиховом кретању; (в) процеса учења или адаптације; (г) интеракција између честица; (д) простора у који су честице смештене (континуум, решетка, мрежа, итд.). Сматра се да је први Л-П модел предложен још 1920. године [А. Ј. Lotka, J. Am. Chemical Soc. **42**, 1595 (1920)]. Овај модел је описивао међусобну интеракцију различитих врста риба које живе у Јадранском мору са циљем да објасни осцилације укупног броја разних врста риба на одређеном станишту. Већина Л-П модела се бави анализом поменутих осцилација и тражењем услова при којима коегзистирају све присутне врсте у систему.

Наш циљ је да у Л-П моделе уведемо, поред претходно наведених компоненти (а) – (д), још и сложену геометрију простора у коме се крећу честице. До сада нису анализирани Л-П модели у којима се кретање честица одиграва у простору у коме постоје препреке које ограничавају њихово кретање. Биће изграђена два Л-П модела на квадратној

решетки који се разликују по степену сложености правила одлучивања приликом кретања предатора, односно плена. У Моделу-1 предатори и плен доносе одлуку о свом кретању само на основу стања на местима својих првих суседа. У Моделу-2 предатори и плен се померају на места својих првих суседа након анализе стања на местима других суседа. Другим речима, они виде прве и друге суседе, те на основу анализе окружења првих суседа доносе одлуку о свом кретању. Биће анализирани модели који представљају комбинацију Модела 1 и 2 (предатор се креће у складу са алгоритмом Модела-1, док се плен руководи алгоритмом Модела-2, и обрнуто).

Величина која ће бити анализирана је временска еволуција броја жртава. Она ће бити одређивана за разне облике и густине препрека. Због тога се предложени модел може једноставно описати као лов у присуству препрека. Комбиновањем Модела 1 и 2 могуће је утицати на ефикасност којом предатори лове жртве, као и на способност са којом плен избегава предаторе. Наш циљ ће бити анализа успешности предатора да ухвати плен, односно плена да избегне предатора. При томе ће њихова успешност бити доведена у везу са обликом, густином и уређеношћу препрека.

Следећа фаза развоја предложеног модела биће увођење ограниченог трајања живота предатора, при чему то време зависи од ефикасности у лову, као и увођење могућности да се плен размножава. Овом надоградњом предложених Модела 1 и 2 биће могуће анализирати осцилације броја предатора и жртви у току времена. Примарни циљ ће бити анализа како на осцилације броја предатора и жртви утичу препреке (њихов облик и густина); тражићемо услове под којим се успоставља режим коегзистенције обе врсте.

Потпројекат 8: Структура и динамика социо-економских система

Руководилац: др Марија Митровић Данкулов

Учесници: др Марија Митровић Данкулов, др Александра Алорић, др Јелена Смиљанић

Студенти докторских студија: Ана Вранић (ментор др Марија Митровић Данкулов)

Социо-економски системи припадају широкој класи комплексних система. Оно што је заједничко за све комплексне системе је да се састоје од великог броја интерагујућих елемената и да испољавају комплексно колективно понашање које није проста сума понашања појединачних елемената система. Ово колективно понашање је управо последица постојања нетривијалних интеракција између елемената који чине комплексан систем. Разумевање основних механизма и параметара који доводе до настанка колективног понашања у комплексном систему и квантитативни опис је основни задатак статистичке физике. Методи и парадигме настали у сврху проучавања колективних феномена у системима који традиционално припадају научној области физике, као што су магнетни системи и Бозе-Ајнштајнови кондензати, показале су се последњих деценија више него корисне за проучавање структуре и динамике социо-економских система. Методи статистичке физике показали су се успешним у налажењу законитости у понашању социо-економских система, опису њихове структуре интеракција, као и разумевању еволуције тих структура. Теоријски модели инспирисани, између осталог, моделима из теорије магнетизма и динамике флуида послужили су као полазна тачка у разумевању динамике ових система и колективних феномена који у њима настају.

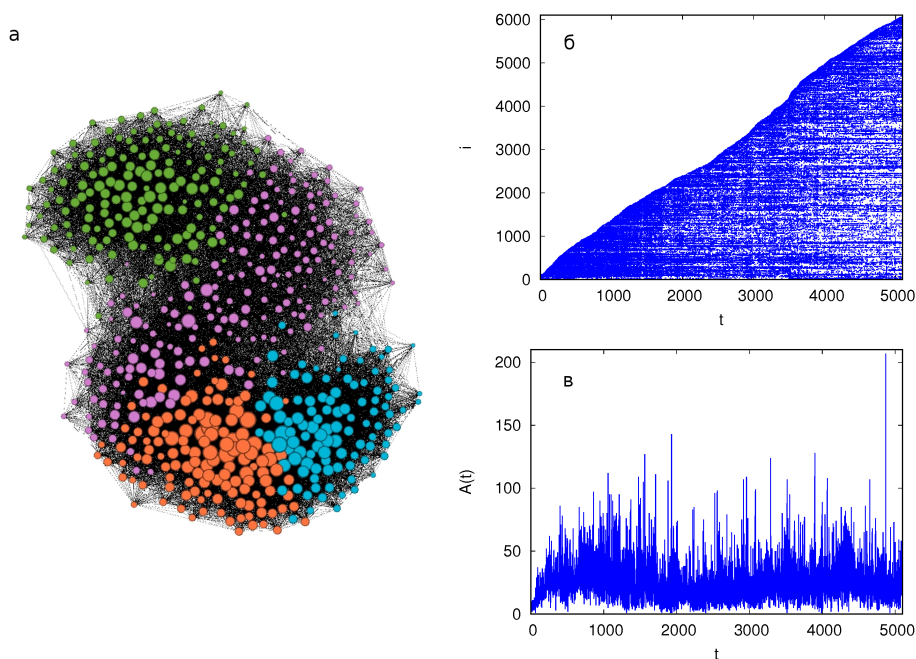
Потреба за формулацијом и постојањем квантитативне теорије социо-економских феномена стара је преко два века. Још у осамнаестом веку су научници приметили да одређене статистичке величине које се односе на економске или социјалне феномене, као што су број новорођених, умрлих или самоубистава, имају релативно стабилне

образце понашања у оквиру истог географско подручја. Приметили су и да разне величине мерене на једној популацији, као што су обим струка или висина, прате нормалну расподелу. Оваква и слична емпиријска запажања убедила су научнике оног доба да у социјалним и економским системима постоје прецизни квантитативни закони, слични онима у физици, упркос непредвидљивом понашању појединаца. Развој Интернета и информационо комуникационих технологија омогућио је приступ великим количинама података о понашању појединаца, социјалних група, фирми и читавих економских екосистема. Доступност ових података довела је до наглог развоја социофизике и еконофизике, и омогућила је дубље разумевање структуре и динамике социо-економских система, као и њиховог међусобног утицаја. Истраживања у оквиру овог потпројекта представљаће основу за докторски рад Ане Вранић.

Истраживачки рад ће се одвијати у оквиру следећих тема:

Тема 8.1: Методологија

У оквиру ове теме биће изучавана структура и динамика, и њихова међусобна веза, неколико различитих социо-економских система. Методологија на којој ће се базирати рад у оквиру ове теме, може се поделити у две подгрупе: емпиријска анализа и теоријско моделирање. Под емпиријском анализом се подразумева квантитативна анализа емпиријских података генерисаних у различитим социо-економским системима коришћењем метода статистичке физике и теорије комплексних мрежа. Теоријско моделирање укључује дизајн, имплементацију, нумеричке симулације једноставних и модела базираних на подацима. Сврха ових модела је да пруже боље разумевање колективног понашања у моделираним системима, као и да се открију основни механизми који условљавају настанак овог понашања.



Слика 8.1: (а) Мрежа оцијалних интеракција добијена пројектовањем бипартитне мреже једне Meetup социјалне групе. Чворови исте боје припадају истој подзаједници, док величина чвора је пропорционална броју социјалних контаката. (б) Образац временске активности појединачних чланова Meetup групе. (в) Временска серија укупне активности чланова Meetup групе.

Постојање интеракција у систему је предуслов за појаву самоорганизованог колективног понашања. Под структуром комплексног система подразумева се пре свега мрежа интеракција између његових елемената. Квантитативни опис, анализа и познавање

еволуције мреже интеракција представља основ за разумевање колективног понашања у једном систему. Мрежа интеракција у комплексним системима није ни случајна нити регуларна, већ има комплексну структуру, што је илустровано на слици 8.1(a). Методе теорије комплексних мрежа развијене су управо са циљем да се та комплексна структура опише на квантитативан начин. У оквиру ове истраживачке теме биће искоришћене познате методе из области теорије комплексних мрежа зарад карактеризације структура интеракција у различитим социо-економским системима. Поред тога, део истраживања у оквиру ове теме ће се односити и на развој нових и верфикацију већ постојећих метода у оквиру теорије комплексних мрежа.

У оквиру емпиријске анализе динамике социо-економских система биће коришћене методе за анализу временских серија, које између осталог укључују и карактеризацију њиховог корелационог и ауто-корелационог профила уз помоћ Фуријеове трансформације, корелационих функција, детрендоване функционалне анализе и Хрстовог експонента. Пример временских образаца активности појединачних чланова као и временске серије укупне активности у социјалним групама дат на слици 8.1. Посебно ће бити испитано постојање самоорганизоване критичности и њен квантитативни опис, кроз анализу спектра снаге и дистрибуције величине и дужине трајања лавина. Стандардним методама статистичке физике биће испитани и описани потенцијални фазни прелази.

У делу који се односи на изучавање структуре социјалне мреже, посебна пажња биће усмерена на њихову мезоскопску структуру и развој метода за њену детекцију и квантитативан опис. Емпиријски подаци на основу којих се одређује структура социјалних, и комплексних мрежа уопште, су често непотпуни и садрже доста шума, који, између осталог онемогућава прецизну детекцију мезоскопске структуре у мрежама. Због тога је неопходно адаптирати и оптимизовати већ постојеће алгоритме за детекцију заједница тако да се уместо детерминистичког користи пробабилистички приступ. ИНФОМАП, алгоритам за детекцију заједница базиран на протоку информација у мрежи се до сада показао као најтачнији метод за детекцију мезоскопске структуре у комплексним мрежама. У оквиру ове теме биће направљена модификација овог алгоритма и биће тестиране његове перформансе на различитим мрежама.

У зависности од феномена који се описује и нивоа описа коме се буде тежило, теоријски модели коришћени у оквиру ове истраживачке теме се могу поделити на једноставне, математичке моделе, и моделе базиране на подацима. Једноставни модели, који ће између осталог укључивати и агент-базиране моделе и моделе раста комплексних мрежа, ће пре свега бити развијани у сврху квалитативног описа одређених феномена и одређивање механизма који су у њиховој основи. Ови модели биће решавани нумеричким поступком, а где је то могуће и аналитички. Модели базирани на подацима пре свега служе за много детаљније описивање динамике самих система, проучавање повезаности и међусобног утицаја структуре и динамике, као и одређивање најзначајних улазних параметара и испитивање како њихове вредности утичу на еволуцију система и крајње стање. Овакве моделе је једино могуће решавати нумеричким путем, који првенствено подразумева нумеричке симулације.

Тема 8.2: Феномени и појаве

Методи налажења социјалних мреже на основу индиректних интеракција

Структура комплексне мреже има велики утицај на динамичке процесе који се одвијају на мрежи. У појединим комплексним системима, конструисање мреже интеракција на основу емпиријских података представља изузетно сложен проблем. На пример, на

основу података о структури бипартитне мреже не може се једнозначно утврдити између којих елемената у пројектованој монопартитној мрежи постоје релевантне везе. До сада је предложено неколико метода које омогућавају разликовање релевантних од случајних интеракција након пројекције бипартитне мреже на отежићену монопартитну мрежу. Најједноставнији поступак је одређивање значајних линкова простим поређењем са неком минималном тежином, тако да ће сви линкови чија је тежина мања од задате минималне вредности бити елиминисани. Недавно је предложен софистициранији метод где се посматра ансамбл бипартитних мрежа са задатим параметрима који има максималну ентропију и применом статистичког теста процењује се да ли линк у пројектованој монопартитној мрежи одговара релевантним или случајним интеракцијама. Други пример су системи у којима су познати подаци о временским серијама које одговарају активностима елемената система и потребно је идентификовати везе између елемената чије је функционисање међусобно условљено. Код оваквих система, уобичајено је да се применом корелације и регресије процени да ли постоји функционална зависност између елемената. У оквиру овог пројекта биће посматрани емпиријски подаци прикупљени из социјалних система чија је динамика дискретна и одређена учествовањем појединаца у колективним активностима. Овакви подаци омогућавају примену сваке од наведених метода за одређивање структуре комплексне мреже, што није било могуће за податке који су коришћени у претходним истраживањима. У склопу пројекта ћемо извршити упоредно испитивање различитих метода за конструисање мреже социјалних интеракција, тестирати њихову зависност од структуре бипартитне мреже и дати процене параметара за које је могуће применити сваку од предложених метода.

Настанак, развој и смрт социјалних заједница

Раст и развој социјалних заједница, као и утицај настанка и старења интеракција на ове процесе, су већ проучавани у великој мери у оквиру области теорије комплексних мрежа. Смрт, односно распад и нестанак социјалних заједница, као и механизми који се налазе у основи ових процеса тек од недавно привлаче пажњу научника. Сви ови процеси у многоме утичу на начин на који се људи организују у заједнице у једном друштву, што са друге стране утиче на друштвене процесе. Ови проблеми су посебно интересантни са аспекта статистичке физике, јер доступност података о настанку, развоју и смрти социјалних заједница даје могућност да се овај феномен проучи у детаље и боље разумеју механизми који одређују ове процесе. У оквиру овог истраживачког задатка биће анализирани подаци о настанку, расту и нестанку социјалних заједница у реалном и виртуелном окружењу. Биће испитано како различити спољни и унутрашњи фактори утичу на опстанак социјалних заједница и какве то последице има на развој социјалног система у оквиру ког ове заједнице постоје. Биће развијени теоријски модели који ће омогућити тестирање хипотеза и одређивање механизма који одређују ове процесе. Посебна пажња ће бити усмерена на испитивање универзалности самих процеса и механизма који их воде. Део истраживања у оквиру ове теме биће и део докторске тезе Ане Вранић

Тржишни монопол и фрагментација тржишта

Индустријски развој, пре свега у домену информационих технологија, донео је значајне примене у тржишним трансакцијама, пре свега у њиховој брзини, количини и обиму али и начину на који се оне одвијају. Половином прошлог века, на Њујоршкој берзи одигравао се највећи број важних трансакција, док се сада и друге стандардне берзе али и разне онлајн платформе и тзв. тамне берзе, такмиче за свој удео у тржишту. Ово повећање броја играча али и диверзитет услуга који нуде враћа дугогодишње питање о фрагментацији тржишта у жижу истраживања. Ранија истраживања указују на то да

фрагментација тржишта настаје само када су берзе или брокери хетерогени у старту, док у осталим ситуацијама, после неког времена завлада монопол. Наша претходна истраживања о спонтаном настанку лојалности услед међусобне адаптације брокера и тржишта, чак и када су обе групације хомогене, отвара простор за истраживање који то други механизми доводе до фрагментације тржишта, да ли је могуће избећи монопол у такмичењу великог броја актера на берзи и да ли ово стање доноси бенефите.

Ширење и интеракција супротстављених информација на мрежи

Развој онлајн медија и доступност различитих информација које пропагирају кроз социјалне мреже, довели су до коегзистенције различитих, неретко потпуно супротстављених ставова у друштву. Неретко су у питању и различити ставови о темама о којима наука већ дуго времена прикупља изванредне експерименталне потврде, те је питање различитих ставова последица неинформисаности, односно прикупљања и пропације информација из непроверених извора. Циљ овог рада је успостављање минималног модела коегзистенције и пропације супротстављених информација на социјалним мрежама, по узору на сличне епидемиолошке моделе. Такође, велика количина података на онлајн социјалним мрежама отвара могућности и емпиријских валидација ових модела.

Потпројекат 9: Емергентна динамика на комплексним мрежама: стохастички ефекти, кашњење у интеракцијама, адаптивност

Руководилац: др Игор Франовић

Учесници: др Игор Франовић

Студенти докторских студија: Ива Бачић (ментор др Игор Франовић)

Током последње две деценије, изузетно је порасло интересовање за интердисциплинарна истраживања заснована на обједињавању резултата о феномену синхронизације, проистеклих из теорије нелинеарне динамике, с резултатима добијеним у оквиру недавно успостављене области науке о мрежама. У оквиру класичног приступа развијеног у теорији нелинеарне динамике, применом методе средњег поља искоришћен је парадигматски Куратомотов модел да би се окарактерисао процес синхронизације, који путем фазног прелаза другог реда доводи до настанка колективне моде у хомогеним популацијама глобално повезаних фазних осцилатора. Такав приступ подразумевао је читав низ поједностављујућих претпоставки, као што су оне о хомогеној структури интеракција и хомогености параметара локалне динамике. Управо је развој теорије науке о мрежама допринео стицању нових увида у карактеризацију великог броја реалних система, од физике и хемије, преко биологије, инжењерства и технологије до социо-економских система, уводећи у проучавање спрегнутих динамичких система нови универзални концепт нелинеарне динамике на комплексним мрежама, које одражавају сложену структуру интеракција на вишеструким просторним и временским скалама, интерполирајући између регуларних и случајних мрежа. Проучавањем различитих примера колективног понашања, од неуронских, метаболичких и генских мрежа, преко система електрохемијских осцилатора, спрегнутих ласера или Цозефсонових спојева, па све до струјних мрежа, финансијских тржишта или различитих форми социјалног понашања људи, као генерички принцип настанка комплексне макроскопске динамике издвојена је емергентност, која имплицира да се систем састављен од великог броја јединица само-организује дајући квалитативно нове форме колективне динамике које није могуће извести или предвидети на основу особина локалне динамике јединица. Такође, на нивоу структуре, као заједнички елемент великог броја реалних система издвојила се чињеница да патерни интеракција имају модуларну структуру, која

укључује подструктуре називане мотивима, кластерима, слојевима, или заједницама, у зависности од конкретне области примене. Уочено је да постојање таквих субструктура, чији су конституенти, у смислу броја или јачина интеракција међусобно повезани чвршће него с остатком мреже, има суштински утицај на само-организовано макроскопско понашање, које зависи од односа интеракција унутар и између модула, као и њиховог садејства с локалном динамиком и екстерним стимулацијама.

У оквиру овог потпројекта, мотивисани пре свега примерима неуронских и других биолошких система, анализираћемо различите форме емергентног понашања на модуларним мрежама спрегнутих ексциtabilних јединица, фокусирајући се на појединачне ефекте или коефекте шума, кашњења у интеракцијама и адаптивности, тј. пластичности структуре мреже. Ексциtabilност је фундаментална карактеристика динамике великог броја биолошких система, укључујући неуроне, ексциtabilне мембране, бета-ћелије панкреаса или ћелије срчаног ткива. Ексциtabilни системи не припадају класи аутономних осцилатора, већ се њихови параметри типично налазе у близини бифуркације која одговара преласку из стационарног стања у режим периодичног осциловања или *vice versa*. Особина ексциtabilности подразумева да побуђени систем може да емитује два суштински различита типа одговара (*spike* или *subthreshold* осцилација) на спољашњу пертурбацију, при чему је *threshold* понашање изузетно нетривијално, тако да је осетљивост система најизраженија у уском домену интензитета пертурбације. Због теоријског значаја уочених феномена емергентне динамике (анализа процеса активације и *threshold* динамике, развој метода анализе емергентних феномена заснованих на синхронизацији јединица), као и потенцијалних апликација (нпр. дескрипција, предвиђање и контрола колективног понашања неуронских мрежа), системи спрегнутих ексциtabilних јединица издвојени су у посебну класу нелинеарних динамичких система, чије проучавање бележи изузетно брз напредак. У случају неуронских мрежа, само-организација заснована на различитим формама синхронизоване активности јединица (асимптотска или транзијента синхронизација јединица, егзактна или хаотична фазна синхронизација, кластер- или парцијална синхронизација, коегзистенција између синхронизоване и несинхронизоване фазе) чини динамичку парадигму колективне активности у кортексу, пружајући основу за процесе обраде информација, као и низ когнитивних процеса, као што су перцепција, пажња, учење и меморија. Динамика неуронских система типично укључује вишеструке просторне и временске скале, што на нивоу модела захтева да се као релевантни елементи укључе шум и експлицитно кашњење у интеракцијама. Док је шум природно повезан с флукуацијама у окружењу и варијабилношћу интринзичних параметара система, кашњења у интеракцијама одражавају чињенице о коначној брзини преноса сигнала, као и латенцију у одговору неуронских система на екстерну стимулацију.

На нивоу локалне динамике, наше истраживање ће се односити на парадигматске моделе ексциtabilности класе I (модел активног ротатора, *integrate-and-fire* неурона и тета-неурона) или класе II (Фицхју-Нагумо модел), као и на једноставне моделе фазних осцилатора. Поред особина локалне динамике, на емергентно понашање на комплексним мрежама значајно утиче особина адаптивности, која се односи на то да патерни интеракције, а самим тим и одговарајућа структура мреже, нису стационарни, већ је њихова спора еволуција одређена активношћу јединица. Као мотивацију, искористићемо познати пример да у неуронским системима постоји пластичност синапси, чије се јачине мењају у складу с релативним временима пристизања импулса с пресинаптичког и постсинаптичког неурона.

Истраживања у оквиру овог потпројекта представљаће основу за докторски рад Иве Бачић.

Планирано је да главни правци будућег истраживања обухвате следеће теме:

Тема 9.1: Анализа сложених просторно-временских патерна активности на мотивима ексциtabilних јединица или мрежама с нелокалном интеракцијом између јединица

Главни циљ истраживања биће испитивање аналогича и разлика између патерна активности на системима ексциtabilних јединица и досад уочених феномена на системима куплованих фазних осцилатора (нпр. химера-стања као сложених патерна коегзистенције синхронизованих и несинхронизованих области у просторно-дистрибуираним системима). Између осталог, комбиновањем различитих метода нумеричке анализе (симулације мултидимензионалних система диференцијалних једначина, нумеричка континуација, континуација уз помоћ програмског пакета AUTO), као и применом теоријских метода (бифуркациона анализа, От-Антонсенова претпоставка) биће испитивани само-локализовани патерни ексцитације на мрежама с нелокалним ексцитаторним интеракцијама и глобалном инхибиторношћу. Планирано је да се утврди да ли је могућа интерполација између класичних химера-стања у системима спрегнутих фазних осцилатора и потенцијалних химера-стања у системима ексциtabilних јединица.

На плану истраживања динамике мотива ексциtabilних јединица, предвиђено је да се утврде услови који би могли да доведу до појаве сложених патерна активности у случају крајње једноставних схема интеракција. Почетни резултати указују да би нови генерички механизам настанка сложених патерна у ексциtabilним системима могао да буде заснован на канард-прелазима, који су последица постојања вишеструких временских скала у локалној динамици јединица. Поред анализе детерминистичке динамике, планирано је да се испитају услови за појаву резонантних ефеката у присуству белог или бојеног шума, укључујући нове сценарије за резонанцу кохеренције или инверзну стохастичку резонанцу.

Тема 9.2: Анализа емергентног феномена спорих стохастичких флукуација средње фреквенције на модулларним неуронским мрежама

Познато је да се активност неурона може описати као двоструки стохастички процес, који се с једне стране манифестује као микроскопска варијабилност у временским серијама појединачних неурона, и с друге стране, као макроскопска варијабилност, која представља емергентну форму колективног понашања на неуронским мрежама. Макроскопска варијабилност се опажа на дугим временским скалама, и укључује споре стохастичке флукуације средње фреквенције емитовања импулса, које настају због спонтаног алтернирања између епизода повишене активности неурона и епизода релативног мировања. Таква алтернирајућа (switching) динамика између различитих колективних стања је од посебног значаја за пирамидалне неуроне у неокортексу, и сматра се да представља динамичку парадигму за реализацију извесних форми учења и меморије.

У оквиру нашег истраживања, анализираћемо услове за појаву switching динамике, с акцентом на садејство између различитих типова шума, кашњења у интеракцијама и хетерогености топологије мреже. У недавно објављеним радовима [Franović et al., Chaos **28**, 023111 (2018); Franović et al., EPL **116**, 48002, (2016)], већ је развијен ефективни модел колективне активности кластероване мреже rate неурона, који омогућава да се процене различити доприноси ефективном макроскопском шуму, као и да се одреде области параметара који омогућавају настанак switching динамике. Од посебног значаја је чињеница да се механизми switching динамике у случајним и модулларним мрежама квалитативно разликују, при чему смо показали да кластеровање доприноси

мултистабилности мреже, чинећи switching феномен робуснијим. Надовезујући се на те резултате, планирано је да се испита како хетерогености у структури мреже модификују њен одговор на различите типове спољашњих стимулација. Анализа одговора система на велике пертурбације биће заснована на недавно развијеној basin-stability методи. Такође, планиран је развој нових теоријских приступа који ће омогућити примену методе средњег поља при опису колективне динамике модуларних мрежа spiking неурона.

Тема 9.3: Мултистабилност и switching динамика у адаптивним неуронским мрежама

Проучаваћемо динамику система спрегнутих екситабилних јединица, где је локална динамика представљена парадигматским моделом активног ротатора, а механизам адаптације мотивисан типичним правилима пластичности синапси у неуронским системима. Планирано је да се истраживање прво фокусира на случај мотива две интерагујуће јединице, како би се стекао увид у механизме настанка мултистабилног понашања, а да се затим анализа прошири и на колективну динамику мрежа. Испитивање услова за настанак мултистабилности, као и границе области параметара које подржавају поједине режиме или њихову коегзистенцију, биће засновано на методама бифуркационе анализе у fast-slow системима (тзв. layer проблем и редуковани проблем).

Претпостављамо да ће се увођењем шума појавити неколико типова стохастичких ефеката, укључујући настанак осцилација индукованих шумом, затим појаву switching динамике између различитих атрактора одговарајућег детерминистичког система, као и појаву различитих резонантних ефеката, као што су резонанца кохеренције и инверзна стохастичка резонанца.

Тема 9.4: Испитивање емергентног феномена макроскопске екситабилности

Класичан приступ у оквиру проучавања система спрегнутих осцилатора је подразумевао да се популација осцилатора третира *per se* као макроскопски осцилатор, чија колективна мода може бити подрвргнута деловању спољашње силе или случајне пертурбације, или може да интерагује с другим колективним модама. У нашем истраживању, планирано је да испитамо под којим условима ансамбл екситабилних јединица и сам постаје макроскопски екситабилни елемент, што је питање од посебног значаја у области теоријске неуронауке. У недавно објављеном раду [Franović et al., Phys. Rev. E **96**, 012226 (2017)] смо користећи ефективни модел колективне динамике заснован на примени методе средњег поља по први пут експлицитно показали особину макроскопске екситабилности на примеру хомогене популације глобално повезаних стохастичких неуронских мапа. Екстензијом наведеног приступа, или алтернативно коришћењем Фокер-Планковог формализма, предвиђено је да се користећи друге парадигматске моделе локалне динамике (модел активног ротатора, Фицхју-Нагумо модел) утврде генерички услови за појаву макроскопске екситабилности. Поред тога, биће испитан однос између микроскопске и макроскопске екситабилности, као и питање како је особина макроскопске екситабилности модификована хетерогеношћу параметара јединица, као хетерогеностима на нивоу структуре мреже. Такође, планирано је да се испитају различити режими макроскопске екситабилности, чије је постојање наговештено у [Franović et al., Phys. Rev. E **96**, 012226 (2017)], као и да се применом бифуркационе анализе на одговарајућим ефективним моделима одреде области параметара који их подржавају. Претпостављамо да ће проширењем метода уведених у [Franović et al., Phys. Rev. E **92**, 062912 (2015); Franović et al., Phys. Rev. E **92**, 062911 (2015)] бити могућа детаљнија анализа threshold динамике макроскопских варијабли, као и процеса активације у присуству шума и кашњења у интеракцијама.

Потпројекат 10: Симулације система наночестица, молекула, и 2д материјала са дугодометним интеракцијама

Руководилац: др Игор Станковић

Учесници: др Игор Станковић

Студенти докторских студија: Миљан Дашић (ментор др Игор Станковић), очекује се ангажман нових докторанада

Једноставни рачунарски модели и макроскопски системи-модели могу да репродукују многе особине комплексних и примењених система који су у овом тренутку тешко доступни у експерименту. Поред тога, једноставни модели и макроскопски системи могли би нам омогућити да разумемо начине како функционише микроскопски (наноскопски) систем и помогну нам да унапредимо дизајн. У оквиру овог потпројекта биће обрађивана три система, два триболошка – јонске течности које су технолошки битне, треће које укључују дводимензионалне материјале у којима се испитују фундаментални аспекти дисипације при трењу, и магнетни системи. Ова истраживања представљаће основу за докторски рад Миљана Дашића.

Тема 10.1: Рачунарска нанотрибологија

Трење је узрок значајних губитака енергије у свим гранама индустрије. На пример, у сектору транспорта губитци због трење приближно представљају једну трећину потрошње горива у возилима, па је боље разумијевање механизма подмазивања пожељно. Поред губитака због трења, хабање покретних делова као повезан механизам са трењем такође узрокује трошкове због потребе за редовном заменом делова. Зато се ова два процеса обично проучавају заједно у оквиру трибологије. Рачунари се користе као алат за истраживање триболошких појава последњих деценија од фундаменталних аспеката до индустријских примена.

Рачунарска нанотрибологија је брзо развијајући дисциплине где је укрштање физике, хемије и машинске инжењерске науке. Триболошки феномени трења, подмазивања и хабају се проучавају на нано нивоу јер мазиво може имати дебљину само неколико молекула. Бројне експерименталне студије фокусиране на формулацију мазива су базирани на испитивањима помоћу апаратуре на бази површинских сила (SFA) и микроскопије на бази атомске сила (AFM), са циљем истраживања молекуларних механизма триболошких феномена. Структура и триболошка својства танких слојева (стабилност, сила трења) или свега неколико молекула на интерфејсу на овај начин може бити мерена у контролисаним условима и упоређена са симулацијама методом молекуларне динамике. При томе симулације на молекуларној скали могу обезбедити увид у процесе које су неопходне за потпуно разумевање: (i) структуре мазива у балку и конфинираног између две површине, (ii) механизме који утичу на брзе промене у понашању система као што су структурне промене у слојевима у случају смицања и/ или промене нормалног оптерећења, (iii) утицај интеракције између мазива и површина. Да би постигли у симулацијама просторне и временске скале које могу бити од значаја за системе од индустријског или фундаменталног интереса, потребно је примијенити одговарајућу симулациону методологију, као што је употреба укрупњавања система (замена неколико аутома функционалном јединицом са сличним особинама) или моделовање само деала система.

У наредном периоду биће истраживана употреба јонских течности као мазива и адитива за смањење трења и хабања. Физичке особине јонских течности, као што су занемарљив притисак паре, висока јонска мобилност и велика разноврсност јонских течности и њихових раствора истичу их као потенцијално релевантне за подмазивање. Катиони и

аниони који чине јонске течности обично су асиметрични и неправилног облика, укључујући дуге алкил ланце везане за катионску главу. Ова гометријска неправилност је важна јер она ефикасно спречава уређење на ниским температурама и кристализацију замењује аморфним стањем. Поред тога, њихова својства могу се модификовати помоћу примјењеног напона на површине. Тренутно не постоји јасна слика како геометрија катиона и аниона утиче на њихово триболошко понашање. Такође није познато како напон примењен на површинама утиче на јонску течност између њих. У наредном периоду у оквиру ове теме радићемо на развоју модела површина (индукованих наелектрисања) као и разумевању утицаја структуре молекула.

Дводимензионални материјали као што су графит, дихалкогениди прелазних метала и хексагонални бор-нитрид имају карактеристично ниско трење због њихове ламеларне структуре и лаког одвајања слојева. Због ових разлога, они су распрострањени као чврста мазива. Ипак, обична мазива нису погодна за нано машине где су ултра танке превлаке са максималном дебљином од само неколико нанометара потребне. Као резултат, атомски танаци, два димензионални материјали и посебно графен су разматрани као чврста мазива за трење и смањење хабања у нано-механичким системима. На нано нивоу комензурабилност површина има велику улогу и зато наука о трењу са разматрањем дводимензионалних материјала како нано лубриканта јавила се потреба за разумевањем трења између две дводимензионалне решетке. Ван дер Валсове хетероструктуре састоје се од епитаксијално гајених органских кристалита на дводимензионалним материјалима и представљају одличан парадигматски систем за истраживање утицај њиховог епитаксијалног односа на трење током бочне манипулације сондом микроскопа на бази атомских сила. Дводимензионални материјали су при томе одличне подлоге за епитаксијални раст органских молекула. Они су атомски глатки без висећих веза и са заобљеним неравнинама чиме се обезбеђује чисти интерфејс између две контактне површине. Иако су студије трења обично ограничене молекулима контаминације и хемијским интеракцијама, дводимензионални материјали могу пружити чисти интерфејс између контактних површина. Истовремено, органски кристалити формирају комплексне епитаксијалне односе са дводимензионалним материјала, док их њихова јака унутрашња анизотропија их чини погодним за АФМ студије феномена везаних за анизотропно трење. У оквиру ове теме биће истраживано трење органских молекула на графену и хексагоналном борон нитриду.

Тема 10.2: Системи са дугодометним интеракцијама

Доминантно понашање система, квантно или класично, одређује се односом просторних димензија система и дужине квантне кохеренције. Стога се може закључити да просторна димензија одређује физичке особине система. Ипак многи магнетни системи одступају од те шеме и постоје случајеви у којима стварно зависно понашање зависи од дужине скале. Као резултат тога, можемо проучавати основне аспекте, тешко приступачне у оригиналној величини. Два значајна примера су космички објект, јер се црне рупе су симулиране електронским магнетним чиповима и микро- и месоскопске величине система као мреже спинских стакала које се опонашају класичним низовима диполарних ротора. Оба система указују на то да физичка својства могу превазићи димензије система. Експерименталне реализације показале су да уређењима макроскопских диполарних ротора могу настати и фрустрирани стања, показујући појаве које нису видљиве у њиховом микроскопском паровима. Штавише, динамичко понашање интерактивних магнетних наноструктура је предмет значајних тренутних истраживања. Ови системи обећавају кандидате за будуће апликације које превазилазе смештај података на магнетним медијумима, нпр. као логички уређаји ниске снаге. Другачија реализација система интеракције дипола је дата од стране $N@C60$, атома азота инкапсулираних у футроле кавеза. Такве структуре флаеренских низова предложене су као алтернативни концепт за скалабилни квантни рачунар.

С обзиром на горе поменуто, ми истражујемо систем који се састоји од дискретних честица које интерагују са (магнетном) диполарном интеракцијом на цилиндричној геометрији као алтернативном средином за испитивање и истраживање равнотеже и динамичких концепата у криволиничном магнетизму и магноници. Очекује се да ће издужена геометрија, азимутна симетрија и закривљеност магнетних наноцеви од континуалног материјала довести до поновљивости, робусности и додатне стабилности равнотежних стања, те их чине поузданим кандидатима за медијуме за великих густине података и као нов дизајн за магнетске уређаје. Без обзира на то, постоје велики изазови у синтези висококвалитетних магнетних наноцеви са прихватљивом површинском храпавости и добро дефинисаним текстурним магнетизацијама како би се избегло запињање таласа поларизације на зидовима домена и несавршеностима, као што су границе зрна и ивице. Наш приступ је да понудимо алтернативни начин реализације уређаја док технологија континуалних магнетних наноцеви не достигне своју зрелост.

Истражујемо две могуће реализације система: микроскопски и макроскопски. На микроскопској скали магнетне наночестице различитих магнетних материјала и облика организоване су тубуларне и спиралне архитектуре добијене помоћу везивања на ДНК, геометријског ограничења, интеракција: магнетски јанус колоиди, коцкасте магнетне наночестице, и асиметричне колоидалне магнетске честице. На макроскопској скали, милиметарски, неодимијумски магнети, представљају добар избор снажног трајног магнета за многе примене. Неодимски магнети су направљени од синтероване легуре гвожђа, неодима и бора. Као трајни магнет, овај материјал је бољи од конвенционалних магнета направљених од легура гвожђа: иако реманенција од 1 до 1.5Т није већа него код других магнетних материјала, али коерцијална јачина поља од око 106А/м је већи за два до четири реда величине. Због тога неодимијумски магнети могу издржати много већа спољашња магнетна поља без демагнетизације. Снагом интеракције може се манипулисати јер сила привлачења између две једнаке сфере зависи од квадрата пречника сфере и куба њихове удаљености.

Досадашња истраживања показују постојање континуалног основног стања у две димензије. Полазећи од бесконачне планарне решетке (троугаоне, квадратне) магнетних честица, истражили смо распад дегенерације основног стања прво у случају бесконачних туба а онда и за коначне тубе. У наредном периоду истраживаћемо како долази до промене поларизације и који је утицај закривљености тубе (одређен полупречником цеви тј. бројем честица у прстену) и њене дужине. Истраживаћемо и понашање система на резонантној феркфенцији и формирање стојећих таласа. Поред тога истраживачемо и основна стања система магнетних коцки са магнетизацијом дуж главне дијагонале и како систем реагује на промену спољњег магнетног поља. Добијени резултати биће упоређивани са конфигурацијама добијеним у експерименту и мерењима.

Потпројекат 11: Карактеризација и адаптација биолошких структура и материјала

Руководилац: др Саша Лазовић

Учесници: др Саша Лазовић, др Ненад Вукмировић, др Марија Митровић Данкулов, др Драган Драмлић

Студенти докторских студија: очекује се ангажман нових докторанада

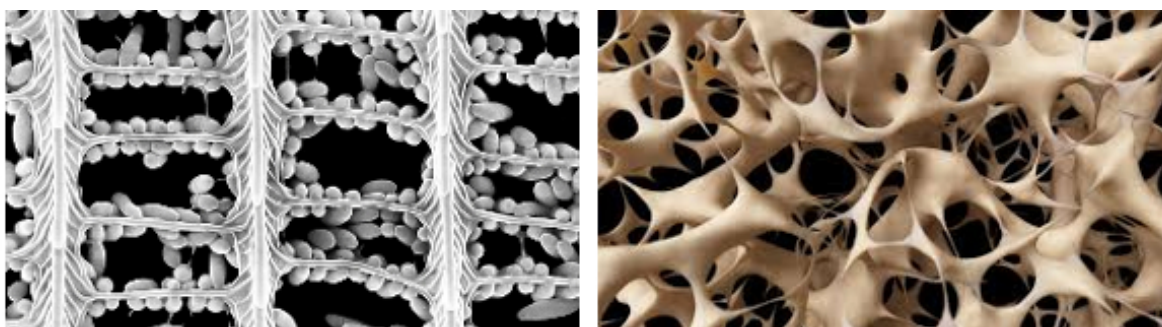
Биомиметика или биомимикрија је имитација система, модела и елемената природе у циљу решавања комплексних проблема у друштву. Многе савремене технологије у области науке о материјалима и енергетици су управо инспирисане биолошким

решењима на микро и нано скали. Ова биолошка решења су резултат еволуције живих организама кроз процес природне селекције и њихове адаптације на њихово окружење.

Биолошки системи који се састоје од великог броја, често хетерогених, интерагујућих елемената спадају у класу комплексних система. Биолошке структуре и материјали који су резултат тих биолошких процеса су инхерентно комплексне структуре.

У циљу успешног имитирања природе, задатак науке је да разуме и опише механизме одговорне за функционисање и настанак биолошких система и структура. У ту сврху неопходно је да се: 1) да развију експерименталне и теоријске методе за карактеризацију и квантитативан опис различитих биолошких система и структура; 3) да се развију теоријски модели који омогућавају да се до детаља проуче биолошки процеси од интереса, одреде релевантни параметри којима се контролише сам процес, као и испита простор параметара и одреде резултати процеса за њихове различите вредности. Ови кораци представљају основ за развој метода за синтетисање материјала налик на биолошке, као и њихову успешну примену. Адаптација биолошких и синтетисаних материјала, кроз хемијске третмане, третмане зрачењем, плазмом, или модификација ласером, представља још један битан корак за развој нових материјала и технологија.

Тема 11.1: Карактеризација и квантитативан опис комплексних биолошких структура



Слика 11.1: (лево) Слика дела биолошке структуре снимљена електронским микроскопом која илуструје комбинацију уређења и неуређења присутну у биолошким структурама. (десно) Шупљикава структура људске кости која је послужила као мотивација за креирање лаких материјала високе чврстине.

Биолошки системи су под утицајем различитих комплексних ограничења: самоорганизација, процесуирање температуре и притиска у окружењу, функционалност (појединачна, би и вишеструка), хијерархија структуре (нано, микро и макро скала), и еволуције и ефеката окружења. Ефекти ових ограничења, који су јединствени и специфични за биолошке системе, видљиви су на различитим биолошким структурама и материјалима. Ове структуре нису регуларне, као на пример кристали, већ су нетривијална комбинација уређености и неуређености на различитим нивоима, и стога се могу сматрати комплексним (Слика 11.1). Управо њихова комплексна структура чини их интересантним како за директну примену у различитим областима индустрије, тако и имитирање њихове структуре може довести до значајног напретка у областима као што су грађевинска индустрија или биомедицини.

Због њихове величине и комплексне структуре, и у зависности од степена неуређености, извесни биолошки елементи могу бити изузетно погодни за примену у области заштите. У оквиру ове теме биће развијена методологија, базирана на методима теорије комплексних система, статистичке физике и науке о подацима, за опис и процену

комплексности структуре биоматеријала. Конкретно, биће развијене методе и мере које ће омогућити да се квантитативно опише структура елемената, као и њихово међусобно упоређивање. Ове методе могу бити универзалне или посебно дизајниране за неки биолошки материјал и структуру. Оне ће представљати основ за теоријски опис биолошких структура и процену њиховог конфигурационог простора, и самим тим њихове погодности за примену у области заштите.

Тема 11.2: Модификација наноструктуре биолошких материјала

Особине многих биолошких материјала зависе од њихове организације на више просторних скала, од хемијског састава који одређује материјал на скали делова нанометра, до уклапања у ткива на скали милиметра. Модификацијама на било којој од ових скала могуће је модификовати биолошке материјале и променити им особине. Просторна организација на скалама између десет нанометара и сто микрометара одређује оптичке особине и интеракцију са течностима уобичајених вискозности и површинског напона.

Биће разматране промене у биолошким полимерима изазване ензимским разбијањем структуре влакана. Биће проучаване механичке особине таквих модификованих полимера као самосталних материјала и као делова организованих структура на већим просторним скалама. Претходна истраживања показала су да папир од ензимски третиране целулозе има смањену слободну енергију површине. Део слободне енергије површине који потиче од диполних интеракција и део који потиче од осталих, дисперзивних, интеракција се током третмана мењају на различит начин. Уз додатни третман површине плазмом, биће развијени метријали погодни за штампање бојама широког спектра особина.

Резултујући материјали су потенцијални супстрати за наношење штампом комплексних флуида какви се користе у електроници заснованој на штампима. Функција ових флуида у електронским уређајима захтева постојање компоненти које реагују само на дисперзивне силе и компоненти које реагују и на поларне и на дисперзивне. Штампа је једноставан начин и јефтин процес у производњи електронских елемената са најзначајнијом применом у штампаним соларним ћелијама.

Тема 11.3: Механичке особине структурираних материјала

У биолошким системима уочљиво је да мали број хемијских једињења организацијом у структуре са различитом порозношћу и обликом организације може створити материјале различитих механичких особина. У ткивима која трпе јака напрезања (Слика 11.1) или су у природи изложена великим променама температуре, структура повећава отпорност на напрезања и очувава механичке особине ткива изложене различитим температурама. У оквиру ове теме биће проучаване особине природног наноструктурираног хитина и развијен модел који објашњава његову изненађујуће велику чврстоћу и отпорност на ломљење.

Код биолошких материјала хемијски састав, микроструктура и састав површине су повезани тако да промена на једном нивоу често повлачи и промену на свим већим просторним скалама. Зато се организација материјала може мењати утицајем на хемијски састав или разбијањем постојећих структура. Применом хемијских третмана и третмана плазмом биће модификована структура и/или функција различитих биолошких материјала, а све у циљу њихове боље функционализације.



Програм развоја научноистраживачког подмлатка Центра за изучавање комплексних система Института за физику у Београду

У оквиру Центра на својим тезама ради већи број студената докторских студија, а такође је ангажовано и неколико мастер студената. Током лета сарадници Центра редовно организују студентске праксе за студенте основних академских студија Физичког факултета Универзитета у Београду, а имали смо и неколико студената из иностранства на пракси. Поред тога, научноистраживачки програм Центра ојачавају и млади истраживачи који су недавно докторирали и који, у највећој мери, одлазе на постдокторско усавршавање у трајању од 2-3 године, након чега се враћају и настављају свој рад у Центру, користећи новостечено знање у истраживањима и покрећући нове теме. Одређени број истраживача Центра представља и повратнике из иностранства, који су докторирали на иностраним универзитетима, а онда се, након постдокторског усавршавања, придружили нашем Центру.

Овде наводимо списак сарадника Центра који су били на постдокторском усавршавању у периоду од 2014. године, или су се у том периоду вратили из иностранства:

1. др Ивана Васић, виши научни сарадник
2. др Марија Митровић Данкулов, виши научни сарадник
3. др Јакша Вучичевић, научни сарадник
4. др Никола Продановић, научни сарадник
5. др Милан Радоњић, научни сарадник
6. др Милош Радоњић, научни сарадник
7. др Михаило Чубровић, научни сарадник
8. др Александра Алорић
9. др Владимир Лончар
10. др Марко Младеновић
11. др Јелена Смиљанић

У наставку дајемо податке о научноистраживачком подмлатку Центра, односно о истраживачима који су докторирали од 2014. године или су тренутно студенти докторских студија:

1) др Јакша Вучичевић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Докторирао 2015. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Тема: "Signatures of Hidden Quantum Criticality in the High-temperature Charge Transport Near the Mott Transition"

Ментор: др Дарко Танасковић, научни саветник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21) J. Vučićević, L. AntoniĆ, M. V. Milovanović, "Paired states at 5/2: PH Pfaffian and particle-hole symmetry breaking"
Phys. Rev. B **98**, 115107 (2018).
doi: 10.1103/PhysRevB.98.115107
2. (M21) J. Vučićević, N. Wentzell, M. Ferrero, and O. Parcollet, "Practical consequences of the Luttinger-Ward functional multivaluedness for cluster DMFT methods"
Phys. Rev. B **97**, 125141 (2018).
doi: 10.1103/PhysRevB.97.125141
3. (M21a) T. Ayrat, J. Vučićević, and O. Parcollet, "Fierz Convergence Criterion: A Controlled Approach to Strongly Interacting Systems with Small Embedded Clusters"
Phys. Rev. Lett. **119**, 166401 (2017).
doi:10.1103/PhysRevLett.119.166401
4. (M21) J. Vučićević, T. Ayrat, and O. Parcollet, "TRILEX and GW+EDMFT approach to d-wave superconductivity in the Hubbard model"
Phys. Rev. B **96**, 104504 (2017).
doi: 10.1103/PhysRevB.96.104504
5. (M21a) J. Vučićević, D. Tanasković, M. Rozenberg, V. Dobrosavljević, "Bad-metal behavior reveals Mott quantum criticality in doped Hubbard models"
Phys. Rev. Lett. **114**, 246402 (2015).
doi: 10.1103/PhysRevLett.114.246402
6. (M21) Helena Bragança, M. C. O. Aguiar, J. Vučićević, D. Tanasković, and V. Dobrosavljević, "Anderson localization effects near the Mott metal-insulator transition"
Phys. Rev. B **92**, 125143 (2015).
doi: 10.1103/PhysRevB.92.125143
7. (M21) J. Vučićević, H. Terletska, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, "Finite temperature crossovers and the quantum Widom line near the Mott transition"
Phys. Rev. B **88**, 075143 (2013).
doi: 10.1103/PhysRevB.88.075143
8. (M21) J. Vučićević, M. O. Goerbig, M. V. Milovanović, "d-wave superconductivity on the honeycomb bilayer"
Phys. Rev. B **86**, 214505 (2012).
doi: 10.1103/PhysRevB.86.214505
9. (M21a) H. Terletska, J. Vučićević, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, "Quantum Critical Transport Near the Mott Transition"
Phys. Rev. Lett. **107**, 026401 (2011).
doi: 10.1103/PhysRevLett.107.026401

План рада за наредне 4 године:

У наредном периоду Јакша Вучичевић ће изучавати моделе интерагујућих електрона на решетки. Од првенственог интереса је Хабардов модел који је релевантан за високотемпературне суперпроводице као што су једињења купрата. Суперпроводност у купратима је у тесној вези са Мотовим изолаторским стањем, псеудо-гап фазом и антиферромагнетизмом, а Хабардов модел квалитативно описује све те појаве. Главни циљ истраживања биће унапређење и развој напредних нумеричких метода вишечестичне квантне теорије за решење модела решетке, али и њихова примена у израчунавању проводности и других релевантних физичких величина.

2) др Никола Продановић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Докторирао 2014. године, Универзитет у Лидсу, Велика Британија

Тема: "Semiconductor Quantum Dots: Intraband Electronic, Optical and Carrier Dynamical Properties"

Ментори: др Ненад Вукмировић, научни саветник, Институт за физику у Београду; проф. Пол Харисон, проф. Зоран Иконић и проф. Драган Инђин, Универзитет у Лидсу

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21a) N. Prodanović, N. Vukmirović, Z. Ikonić, P. Harrison, and D. Indjin, "Importance of Polaronic Effects for Charge Transport in CdSe Quantum Dot Solids" *J. Phys. Chem. Lett.* **5**, 1335-1340 (2014).
doi: 10.1021/jz500086c
2. (M22) N. Prodanović, V. Milanović, Z. Ikonić, D. Indjin, and P. Harrison, "Bound States in Continuum: Quantum Dots in a Quantum Well" *Phys. Lett. A* **377**, 2177 (2013).
doi: 10.1016/j.physleta.2013.05.051
3. (M21) N. Prodanović, N. Vukmirović, D. Indjin, Z. Ikonić, P. Harrison, "Electronic States and Intraband Terahertz Optical Transitions in InGaAs Quantum Rods" *J. Appl. Phys.* **111**, 073110 (2012).
doi: 10.1063/1.3692069
4. (M21) N. Prodanović, Z. Ikonić, D. Indjin, and P. Harrison, "Relationship Between Electron-LO Phonon and Electron-light Interaction in Quantum Dots" *Phys. Rev. B* **85**, 195435 (2012).
doi: 10.1103/PhysRevB.85.195435
5. (M21) N. Prodanović, J. Radovanović, V. Milanović, and S. Tomić, "Optimization of InAs/AlInAs Quantum Wells Based Up-converter for Silicon Solar Cells" *J. Appl. Phys.* **110**, 063713 (2011).
doi: 10.1063/1.3641977
6. (M22) N. Prodanović, J. Radovanović, and V. Milanović, "Photonic Crystals with Bound States in Continuum and Their Realization by an Advanced Digital Grading Method" *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 415304 (2009).
doi: 10.1088/1751-8113/42/41/415304

План рада за наредне 4 године:

У наредном периоду др Никола Продановић ће радити на довршавању текућег рада на рачунању покретљивости поларона у системима са локалном електрон-фонон интеракцијом. Након тога ће започети и нови правац истраживања везан за примену техника машинског учења у моделовању физичких система.

3) др Александра Алорић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика и рачунарске науке.

Докторирала 2017. године, Краљевски колеџ у Лондону, Велика Британија

Тема: "Spontaneous Segregation of Adaptive Agents in Auctions"

Ментор: Peter Sollich, професор, Краљевски колеџ у Лондону

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M13) A. Alorić, P. Sollich, and P. McBurney, "Spontaneous Segregation of Agents Across Double Auction Markets" in F. Amblard, F. J. Miguel, A. Blanchet, B. Gaudou (ed.), *Advances in Artificial Economics*, pp. 79 - 90, Springer, Cham (2015). ISBN: 978-3-319-09578-3
2. (M21) A. Alorić, P. Sollich, P. McBurney, and T. Galla, "Emergence of Cooperative Long-term Market Loyalty in Double Auction Markets" *PloS One* **11**, e0154606 (2016). doi: 10.1371/journal.pone.0154606

План рада за наредне 4 године:

Александра Алорић ће анализирати структуре и динамике биолошких и социоекономских комплексних система методама статистичке физике и обрадом емпиријских података. Специјално, биће испитани: системи адаптивних тржишта и брокера са циљем разумевања спонтаног настанка монопола и фрагментације; биолошки системи методама еволутивне теорије игара са циљем разумевања спонтаног настанка специјације; ширење и интеракција супротстављених информација у социјалним мрежама и њихов утицај на формирање ставова.

4) др Владимир Лончар

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, рачунарске науке и физика

Докорирао 2017. године, Природно-математички факултет, Универзитет у Н. Саду
Тема: "Hybrid Parallel Algorithms for Solving Nonlinear Schroedinger Equation"

Ментор: др Антун Балаж, научни саветник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M13) V. Lončar, I. Vasić, and A. Balaž, "Efficient Numerical Tools for Solving the Nonlinear Schroedinger Equation" in C. Erling (ed.), *Scientific Computing: Studies and Applications*, pp. 63 - 158, Nova Science Publishers (2017). ISBN: 978-1-53612-564-1
2. (M21a) L. Young-S., P. Muruganandam, S. K. Adhikari, V. Lončar, D. Vudragović, and A. Balaž, "OpenMP GNU and Intel Fortran Programs for Solving the Time-dependent Gross–Pitaevskii Equation" *Comput. Phys. Commun.* **220**, 503 (2017). doi: 10.1016/j.cpc.2017.07.013
3. (M21a) V. Lončar, L. Young-S., S. Škrbić, P. Muruganandam, S. K. Adhikari, and A. Balaž, "OpenMP, OpenMP/MPI, and CUDA/MPI C Programs for Solving the Time-dependent Dipolar Gross–Pitaevskii Equation" *Comput. Phys. Commun.* **209**, 190 (2016). doi: 10.1016/j.cpc.2016.07.029
4. (M21a) V. Lončar, A. Balaž, A. Bogojević, S. Škrbić, P. Muruganandam, and S. K. Adhikari, "CUDA Programs for Solving the Time-dependent Dipolar Gross-Pitaevskii Equation in an Anisotropic Trap" *Comput. Phys. Commun.* **200**, 406 (2016). doi: 10.1016/j.cpc.2015.11.014

План рада за наредне 4 године:

У наредне 4 године Владимир Лончар ће се бавити развојем паралелних алгоритама који се примењују у физици ултрахладних атома. Поред алгоритама намењених нумеричким симулацијама теорије средњег поља за Бозе-Ајнштајн-кондензоване системе, бавиће се и алгоритмима за диполне Бозе системе, као и имплементацијом квантних флукуација које се добијају применом Хартри-Фок теорије за контактну и дипол-дипол интеракцију. Такође, бавиће се проучавањем утицаја диполне интеракције на формирање вортекса у Бозе-Ајнштајн кондензатима као последицу брзе ротације система или кретања препреке кроз њега.

5) др Марко Младеновић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Докторирао 2017. године, Електротехнички факултет, Универзитет у Београду
Тема: "Electronic Properties of Interfaces Between Domains in Organic Semiconductors"

Ментор: др Ненад Вукмировић, научни саветник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21a) M. Mladenović and N. Vukmirović, "Charge Carrier Localization and Transport in Organic Semiconductors: Insights from Atomistic Multiscale Simulations"
Adv. Func. Mater **25**, 1915-1932 (2015).
doi: 10.1002/adfm.201402435
2. (M21) M. Mladenović, N. Vukmirović, and I. E. Stanković, "Electronic States at Low-Angle Grain Boundaries in Polycrystalline Naphthalene"
J. Phys. Chem. C **117**, 15741 (2013).
doi: 10.1021/jp404825h
3. (M21) M. Mladenović and N. Vukmirović, "Effects of Thermal Disorder on the Electronic Properties of Ordered Polymers"
Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 25950-25958 (2014).
doi: 10.1039/c4cp04425h
4. (M21) M. Mladenović and N. Vukmirović, "Electronic States at the Interface Between Crystalline and Amorphous Domains in Conjugated Polymers"
J. Phys. Chem. C **119**, 23329 (2015).
doi: 10.1021/acs.jpcc.5b06673
5. (M21) M. Mladenović and N. Vukmirović, "Spontaneous Polarization Induced by Side Chains in Ordered Poly(3-hexylthiophene)"
J. Phys. Chem. C **120**, 18895 (2016).
doi: 10.1021/acs.jpcc.6b05551
6. (M22) M. Mladenović, N. Vukmirović, and I. E. Stanković, "Atomic and Electronic Structure of Grain Boundaries in Crystalline Organic Semiconductors"
Phys. Scr. T **157**, 014061 (2013).
doi: 10.1088/0031-8949/2013/T157/014061
7. (M24) M. Mladenović and I. E. Stanković, "Monte Carlo Simulations of Crystalline Organic Semiconductors"
Serb. J. Elec Eng. **10**, 125 (2013).
doi: 10.2298/SJEE1301125M

План рада за наредне 4 године:

У наредне четири године, др Марко Младеновић ће радити на испитивању електронских особина халидних перовскита, као и других сродних материјала који се могу примењивати у соларним ћелијама. У првој фази, извршиће се скенирање

потенцијалних материјала, кроз прорачун њихових електронских особина. Потом ће се радити на формирању модела који би описао транспорт носилаца у овим материјалима. Такође, биће испитиван и утицај границе између апсорбера и транспортног материјала електрона и шупљина на укупне перформансе соларне ћелије.

6) др Јелена Смиљанић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика и рачунарске науке

Докторирала 2017. године, Електротехнички факултет, Универзитет у Београду
Тема: "Испитивање својстава комплексних мрежа са дискретном динамиком"

Ментор: др Марија Митровић Данкулов, виши научни сарадник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M13) M. M. Dankulov and J. Smiljanić, "The Structure and Dynamics of Meetup Social Networks"
in C. Erling (ed.), *Scientific Computing: Studies and Applications*, pp. 33 - 62, Nova Science Publishers (2017).
ISBN: 978-1-53612-564-1
2. (M21) J. Smiljanić and M. M. Dankulov, "Associative nature of event participation dynamics: A network theory approach"
PLoS ONE **12**, e0171565 (2017).
doi: 10.1371/journal.pone.0171565
3. (M21) J. Smiljanić, A. Chatterjee, T. Kauppinen, M. M. Dankulov, "A Theoretical Model for the Associative Nature of Conference Participation"
PLoS ONE **11**, e0148528 (2016).
doi: 10.1371/journal.pone.0148528
4. (M21a) J. Smiljanić, M. Žeželj, V. Milanović, J. Radovanović and I. Stanković, "MATLAB-based program for optimization of quantum cascade laser active region parameters and calculation of output characteristics in magnetic field"
Comput. Phys. Commun. **185**, 998 (2014).
doi: 10.1016/j.cpc.2013.10.025
5. (M22) J. Smiljanić and I. E. Stanković, "Efficient Routing on Small Complex Networks Without Buffers"
Physica A **392**, 2294 (2013).
doi: 10.1016/j.physa.2013.01.033

План рада за наредне 4 године:

Јелена Смиљанић ће се бавити оптимизацијом алгоритама за детекцију заједница у комплексним мрежама. Оптимизација ће се применити на алгоритам заснован на протоку информација у мрежи. Како емпиријски подаци који се користе за одређивање структуре реалних комплексних мрежа могу бити непоуздани, што узрокује грешке приликом одређивања заједница, постојећи алгоритам је потребно модификовати тако да се уместо детерминистичког користи пробабилистички приступ. Поред тога, задатак ће бити и да се испита како структура мреже утиче на перформансе алгоритама.

7) Ива Бачић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 3. године докторских студија физике

Уписана 2015. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Ментор: др Игор Франовић, научни сарадник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21) I. Franović, O. V. Maslennikov, I. Bačić, and V. I. Nekorkin: "Mean-field Dynamics of a Population of Stochastic Map Neurons" *Phys. Rev. E* **96**, 012226 (2017).
doi: 10.1103/PhysRevE.96.012226
2. (M21) I. Bačić, I. Franović, and M. Perc, "Disordered Configurations of the Glauber Model in Two-dimensional Networks", *EPL* **120**, 68001 (2017).
doi: 10.1209/0295-5075/120/68001

План рада за наредне 4 године:

Одбрана теме докторске тезе Иве Бачић се очекује у децембру 2018. године, а завршетак рада на самој тези и њена одбрана се очекују током 2019. године. У међувремену се планира припрема и објављивање неколико радова из области емергентне динамике у системима куплованих ексцитабилних јединица, на основу резултата добијених у претходном периоду, а који ће бити део докторске тезе. Након одбрањене тезе, план кандидата је да настави истраживање у истој области и оде у иностранство на постдокторско усавшавање.

8) Владимир Вељић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 3. године докторских студија физике

Уписан 2013. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Одбранио тему докторске тезе 2017. године под називом: " Quantum kinetic theory for ultracold dipolar Fermi gases "

Ментор: др Антун Балаж, научни саветник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21) V. Veljić, A. Balaž, and A. Pelster, "Time-of-flight Expansion of Trapped Dipolar Fermi Gases: from the Collisionless to the Hydrodynamic Regime" *Phys. Rev. A* **95**, 053635 (2017).
doi: 10.1103/PhysRevA.95.053635
2. (M21) V. Veljić, A. R. P. Lima, L. Chomaz, S. Baier, M. J. Mark, F. Ferlaino, A. Pelster, and A. Balaž, " Ground State of an Ultracold Fermi Gas of Tilted Dipoles in Elongated Traps" *New J. Phys.* **20**, in press (2018).
doi: 10.1088/1367-2630/aade24

План рада за наредне 4 године:

У наредне 4 године Владимир Вељић ће наставити рад на својој тези везаној за физику ултрахладних диполних Ферми гасова. Из ове области он је већ објавио два рада, у којима је проучавао деформацију Ферми површи у присуству дипол-дипол интеракције, а након тога је уопштио варијациону теорију засновану на Болцмановој кинетичкој једначини тако да описује и случај произвољне оријентације дипола. У наредном периоду ће применити развијени формализам на јако диполне Ферми гасове молекула са перманентним електричним диполном моментом, а проучаваће и динамику оваквих система. Одбрана докторске дисертације се планира за 2019. годину.

9) Ана Вранић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 1. године докторских студија физике

Уписана 2017. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Ментор: др Марија Митровић Данкулов, виши научни сарадник, Институт за физику у Београду

План рада за наредне 4 године:

Главна тема истраживања докторанда биће структура и динамика социјалних мрежа, као и колективних феномена на њима. Први корак у истраживању биће анализа емпиријских података о успешности социјалних заједница везаних за феномен колективног знања. Коришћењем метода статистичке физике и теорије комплексних мрежа биће анализирани емпиријски подаци и одређени механизми и параметри који утичу на успешност и еволуцију социјалних заједница. Током рада на емпиријској анализи биће развијени додатни методи и алати који омогућавају бољи опис структуре и динамике еволуирајућих социјалних мрежа. Идентификовани релевантни параметри и механизми ће затим послужити за развој модела еволуције социјалних мрежа. Ови модели ће послужити као основа за детаљну анализу утицаја различитих параметара на еволуцију социјалне мреже као и њихових вредности. Резултати рада представљаће основ за креирање реалних модела коеволуције социјалних мрежа и различитих динамике, укључујући динамике мишљења, колективног знања и емоција. Одбрана докторске дисертације се планира за 2021. годину.

10) Душан Вудраговић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 3. године докторских студија физике

Уписан 2016. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Одбранио тему докторске тезе 2017. године под називом: "Faraday waves in ultracold dipolar Bose gases"

Ментор: др Антун Балаж, научни саветник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M13) D. Vudragović and A. Balaž, "Science gateway for the Serbian condensed matter physics community" in P. Kacsuk (ed.), *Science Gateways for Distributed Computing Infrastructures*, pp. 209-220, Springer (2014). ISBN: 978-3-319-11267-1
2. (M13) D. Stanković, P. Jovanović, A. Jović, V. Slavnić, D. Vudragović, and A. Balaž, "Implementation and Benchmarking of New FFT Libraries in Quantum ESPRESSO" in M. Dulea et al. (ed.), *High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities*, pp. 155–162, Springer (2014). ISBN: 978-3-319-01519-4
3. (M23) D. Vudragović, L. Plić, P. Jovanović, S. Ničković, A. Bogojević, and A. Balaž, "VI-SEEM DREAMCLIMATE Service" *Scal. Comput. Pract. Exp.* **19**, 215 (2018). doi: 10.12694/scpe.v19i2.1396

4. (M21a) L. Young-S., P. Muruganandam, S. K. Adhikari, V. Lončar, D. Vudragović, and A. Balaž, "OpenMP GNU and Intel Fortran Programs for Solving the Time-dependent Gross-Pitaevskii Equation" *Comput. Phys. Commun.* **220**, 503 (2017).
doi: 10.1016/j.cpc.2017.07.013
5. (M21a) L. Young-S., D. Vudragović, P. Muruganandam, S. K. Adhikari, and A. Balaž, "OpenMP Fortran and C programs for solving the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in an anisotropic trap" *Comput. Phys. Commun.* **204**, 209 (2016).
doi: 10.1016/j.cpc.2016.03.015
6. (M21) B. P. Marinković, V. Vujčić, G. Sushko, D. Vudragović, D. B. Marinković, S. Đorđević, S. Ivanović, M. Nešić, D. Jevremović, A. V. Solov'yov, and N. J. Mason, "Development of collisional data base for elementary processes of electron scattering by atoms and molecules" *Nucl. Instrum. Meth. B* **354**, 90 (2015).
doi: 10.1016/j.nimb.2014.12.039
7. (M21a) R. K. Kumar, L. E. Young-S, D. Vudragović, A. Balaž, P. Muruganandam, and S. K. Adhikari, "Fortran and C programs for the time-dependent dipolar Gross-Pitaevskii equation in an anisotropic trap" *Comput. Phys. Commun.* **195**, 117 (2015).
doi: 10.1016/j.cpc.2015.03.024
8. (M21a) D. Vudragović, I. Vidanović, A. Balaž, P. Muruganandam, and S. K. Adhikari, "C programs for solving the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap" *Comput. Phys. Commun.* **183**, 2021 (2012).
doi: 10.1016/j.cpc.2012.03.022
9. (M21) A. Balaž, I. Vidanović, D. Stojiljković, D. Vudragović, A. Belić, and A. Bogojević, "SPEEDUP code for calculation of transition amplitudes via the effective action approach" *Commun. Comput. Phys.* **11**, 739 (2012).
doi: 10.4208/cicp.131210.180411a

План рада за наредне 4 године:

У наредне 4 године Душан Вудраговић ће проучавати колективне осцилације и параметарске резонанце у јако диполним Бозе-Ајнштајн кондензатима. Посебно ће истраживати појаву Фарадејевих таласа, односно таласа густине индукованих хармонијском модулацијом параметара система (јачине интеракције или фреквенција потенцијалне замке у којој се систем налази). Испитаће зависност особина генерисаних Фарадејевих таласа и других колективних мода од јачине диполне и контактне интеракције користећи нумеричке симулације и варијационо моделирање. Одбрана докторске дисертације се планира за 2019. годину.

11) Willem-Victor van Gerven Oei

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 3. године докторских студија физике

Уписан 2014. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Одбранио тему докторске тезе 2017. године под називом: "Magnetic impurities in superconductors: Subgap states in quantum dots and effects of periodic local moments"

Ментор: др Дарко Танасковић, научни саветник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21) W. van Gerven Oei, D. Tanasković, and R. Žitko, "Magnetic Impurities in Spin-split Superconductors"
Phys. Rev. B **95**, 085115 (2017).
doi: 10.1103/PhysRevB.95.085115
2. (M21) P. Balazs, W. van Gerven Oei, and K. Marton, "On Form Factors in Nested Bethe Ansatz Systems"
J. Phys. A: Math. Theor. **45**, 465007 (2012).
doi: 10.1088/1751-8113/45/46/465007

План рада за наредне 4 године:

План за наредни период је да кандидат заврши рад на тези до средине 2019. године. Тренутно кандидат ради на својој другој публикацији везаној за магнетне нечистоће у суперпроводницима. Засад су добијени прелиминарни резултати и прикупљају се нови резултати симулација. План је да се рад пошаље у часопис до краја 2018. године, након чега ће кандидат радити на писању тезе.

12) Миљан Дашић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 3. године докторских студија физике

Уписан 2014. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Одбранио тему докторске тезе 2017. године под називом: "Modelling the behaviour of confined dipolar and ionic systems"

Ментор: др Игор Станковић, виши научни сарадник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21) I. Stanković, M. Dašić and R. Messina, "Structure and cohesive energy of dipolar helices"
Soft Matter **12**, 3056 (2016).
doi: 10.1039/C5SM02774H
2. (M21) K. Gkagkas, V. Ponnuchamy, M. Dašić and I. Stanković, "Molecular dynamics investigation of a model ionic liquid lubricant for automotive applications"
Tribology Int. **113**, 83 (2017).
doi: 10.1016/j.triboint.2016.12.017

План рада за наредне 4 године:

План у наредном периоду је да се наставе и доврше започета истраживања везана за конфиниране диполарне и јонске системе. До сада су на тој теми објављена два рада у међународним часописима. Још два рада су у процесу рецензије, а један рад се припрема и очекује се да ће бити послат у наредних месец дана. Након тога, докторанд ће радити на писању, припреми и одбрани докторске тезе, а процењена година одбране тезе је 2019. година.

13) Вељко Јанковић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 3. године докторских студија физике

Уписан 2014. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

У септембру 2018. године предао докторску тезу под називом: "Exciton Dynamics at Photoexcited Organic Heterojunctions"

Ментор: др Ненад Вукмировић, научни саветник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21) V. Janković and N. Vukmirović, "Combination of Charge Delocalization and Disorder Enables Efficient Charge Separation at Photoexcited Organic Bilayers" *J. Phys. Chem. C* **122**, 10343 – 10359 (2018).
doi: 10.1021/acs.jpcc.8b03114
2. (M21) V. Janković and N. Vukmirović, "Identification of Ultrafast Photophysical Pathways in Photoexcited Organic Heterojunctions" *J. Phys. Chem. C* **121**, 19602 – 19618 (2017).
doi: 10.1021/acs.jpcc.7b05582
3. (M21) V. Janković and N. Vukmirović, "Origin of space-separated charges in photoexcited organic heterojunctions on ultrafast time scales" *Phys. Rev. B* **95**, 075308 (2017).
doi: 10.1103/PhysRevB.95.075308
4. (M21) V. Janković and N. Vukmirović, "Dynamics of exciton formation and relaxation in photoexcited semiconductors" *Phys. Rev. B* **92**, 235208 (2015).
doi: 10.1103/PhysRevB.92.235208
5. (M21) V. Janković and N. Vukmirović, "Nonequilibrium optical conductivity in materials with localized electronic states" *Phys. Rev. B* **90**, 224201 (2014).
doi: 10.1103/PhysRevB.90.224201

План рада за наредне 4 године:

Одбрана докторске тезе се очекује у децембру 2018. или јануару 2019. године. У блиској будућности, кандидат планира да до сада остварене резултате на пољу раздвајања наелектрисања у органским соларним ћелијама употпуни детаљнијим проучавањем временских скала и фотофизичких путања раздвајања из јако везаних екситонских стања. План кандидата је да то постигне користећи теорију отворених квантних система, са посебним освртом на обједињени третман ефеката делокализације, неуређености и интеракције са околином. Овакав краткорочни план ће кандидата оспособити да се у даљој будућности укључи у актуелна истраживања из области транспорта наелектрисања и/или енергије и у другим наносистемима, као што су фотосинтетички комплекси или молекуларни спојеви. Жеља кандидата је да се са тим темама ближе упозна кроз постдокторско усавршавање у релевантним групама у иностранству.

14) Милан Јоцић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 2. године докторских студија физике

Уписан 2016. године, Природно-математички факултет, Универзитет у Нишу

Ментор: др Ненад Вукмировић, научни саветник, Институт за физику у Београду

План рада за наредне 4 године:

Студент ће се бавити електронским особинама наноструктура на бази халидних перовскитних материјала. Најпре ће бити рађени прорачуни зонске структуре ових материјала, на основу којих ће бити параметризован k-p модел који ће се користити за

прорачун електронских стања квантних тачака на бази ових материјала. Затим ће се разматрати особине екситона у перовскитним квантним тачкама, као и релаксација носилаца у овим структурама услед ефеката електрон-фонон интеракције. Завршетак рада на тези се очекује 2021. године.

15) Даница Стојиљковић

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 3. године докторских студија физике

Уписана 2016. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Ментор: др Слободан Врховац, научни саветник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21) D. Stojiljković and S. B. Vrhovac, "Kinetics of Particle Deposition at Heterogeneous Surfaces" *Physica A* **488**, 16-29 (2017).
doi: 10.1016/j.physa.2017.06.031
2. (M21) J. R. Šćepanović, D. Stojiljković, Z. M. Jaksić, Lj. Budinski-Petković, and S. B. Vrhovac, "Response Properties in the Adsorption-desorption Model on a Triangular Lattice" *Physica A* **451**, 213 (2016).
doi: 10.1016/j.physa.2016.01.055
3. (M21) D. Stojiljković, J. R. Šćepanović, S. B. Vrhovac, and N. M. Švrakić, "Structural Properties of Particle Deposits at Heterogeneous Surfaces" *J. Stat. Mech.-Theory Exp.* **2015**, P06032 (2015).
doi: 10.1088/1742-5468/2015/06/P06032
4. (M21) A. Balaž, I. Vidanović, D. Stojiljković, D. Vudragović, A. Belić, and A. Bogojević, "SPEEDUP Code for Calculation of Transition Amplitudes Via the Effective Action Approach" *Commun. Comput. Phys.* **11**, 739 (2012).
doi: 10.4208/cicp.131210.180411a
5. (M21) D. Stojiljković, A. Bogojević, and A. Balaž, "Efficient Calculation of Energy Spectra Using Path Integrals" *Phys. Lett. A* **360**, 205 (2006).
doi: 10.1016/j.physleta.2006.08.035

План рада за наредне 4 године:

У наредном периоду докторанд ће проучавати кинетику таложења сферних честица на неуниформним површинама коришћењем методе случајне секвенцијалне адсорпције. Нумеричке симулације ће пружити увид у опште понашање функције покривања и указати на разлике између процеса таложења у континуалној средини и истог процеса на решеткама. Очекивани, као и раније објављени резултати ће бити основа докторске тезе Данице Стојиљковић, чија одбрана се планира за 2019. годину.

16) Ана Худомал

Област научноистраживачког рада: природно-математичке науке, физика

Студент 3. године докторских студија физике

Уписана 2015. године, Физички факултет, Универзитет у Београду

Ментор: др Ивана Васић, виши научни сарадник, Институт за физику у Београду

Објављени радови категорија M10 и M20:

1. (M21a) V. Dmitrašinović, M. Šuvakov, and A. Hudomal, "Gravitational Waves from Periodic Three-Body Systems"
Phys. Rev. Lett. **113**, 101102 (2014).
doi: 10.1103/PhysRevLett.113.101102
2. (M21) V. Dmitrašinović, A. Hudomal, M. Shibayama, and A. Sugita, "Linear Stability of Periodic Three-body Orbits with Zero Angular Momentum and Topological Dependence of Kepler's Third Law: a Numerical Test"
J. Phys. A: Math. Theor. **51**, 315101 (2018).
doi: 10.1088/1751-8121/aaca41

План рада за наредне 4 године:

У наредном периоду докторанд планира да настави нумеричко проучавање квантних гасова у оптичким решеткама са флуksom, са циљем да испита улогу интеракција у тополошки нетривијалним вођеним системима. Докторанд ће прво испитивати динамику слабо-интерагујућих некохерентних бозона, а затим и системе са јаким интеракцијама. Одбрана теме докторске тезе под називом "Numerical study of quantum gases in optical lattices with flux" је планирана за крај 2018. године, док је процењена година одбране тезе 2021.