



Програм научноистраживачког рада Центра за изучавање комплексних система Института за физику у Београду (2023 – 2028)

Комплексни системи су једна од важних парадигми у савременој физици, при чему је једна од њихових основних особина да нетривијално физичко 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 пет потпројеката, а сви потпројекти су организовани кроз истраживачке теме. Сваки потпројекат Центра предводи један искусан руководилац, 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, руководилац Центра
2. др Ненад Вукмировић, научни саветник, заменик руководиоца Центра
3. др Александар Белић, научни саветник
4. др Александар Богојевић, научни саветник
5. др Слободан Врховац, научни саветник
6. др Милица Миловановић, научна саветница
7. др Слободан Првановић, научни саветник
8. др Дарко Танасковић, научни саветник
9. др Саша Лазовић, научни саветник
10. др Зорица Јакшић, научна саветница
11. др Игор Станковић, научни саветник
12. др Ивана Васић, виша научна сарадница
13. др Марија Митровић Данкулов, виша научна сарадница
14. др Јакша Вучичевић, виши научни сарадник
15. др Милан Радоњић, виши научни сарадник

16. др Игор Франовић, виши научни сарадник
17. др Душан Вудраговић, научни сарадник
18. др Јулија Шћепановић, научна сарадница
19. др Михаило Чубровић, научни сарадник
20. др Владимир Лончар, научни сарадник
21. др Јелена Смиљанић, научна сарадница
22. др Вељко Јанковић, научни сарадник
23. др Миљан Дашић, научни сарадник
24. др Ана Худомал, научна сарадница
25. др Ива Бачић, научна сарадница
26. др Соња Предин, научна сарадница
27. др Наташа Аџић, научна сарадница
28. др Марија Јанковић, научна сарадница
29. др Дарија Обрадовић, научна сарадница
30. др Даница Стојиљковић, научна сарадница

Млади истраживачи Центра за изучавање комплексних система (студенти докторских студија):

31. Ана Вранић, истраживачица сарадница
32. Милан Јоџић, истраживач сарадник
33. Сузана Миладић, истраживачица сарадница
34. Петар Митрић, истраживач сарадник
35. Марија Шиндик, истраживачица приправница
36. Дарја Цветковић, истраживачица приправница
37. Владан Геџин, истраживач приправник

Технички сарадници Центра за изучавање комплексних система (истраживачи у стручним звањима):

38. Ђорђе Трајковић, стручни сарадник

Спољашњи сарадници Центра за изучавање комплексних система:

1. др Марко Младеновић, виши научни сарадник
2. др Милош Радоњић, виши научни сарадник
3. др Александра Алорић, научна сарадница

Област научноистраживачког рада свих истраживача Центра за изучавање комплексних система су природно-математичке науке, физика. Главне области физике којима се Центар бави су квантна статистичка физика, теорија кондензованог стања, квантна механика, статистичка физика, математичка физика и нелинеарна динамика.

Истраживачи Центра ангажовани у израдама докторских теза – менторски рад:

1. Др Антун Балаж је ментор за израду докторске дисертације Марије Шиндик на Физичком факултету Универзитета у Београду. Он је био ментор докторских дисертација др Владимира Вељића, др Душана Вудраговића и др Иване Васић, одбрањених на Физичком факултету Универзитета у Београду. Он је такође био ментор докторских дисертација др Владимира Лончара на Природно-математичком факултету Универзитета у Новом Саду и др Богдана Сатарића на Факултету техничких наука Универзитета у Новом Саду.
2. Др Ненад Вукмировић је ментор за израду докторских дисертација Милана Јоџића на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу и Сузана Миладић на Физичком факултету Универзитета у Београду. Он је био ментор докторских дисертација др Вељка Јанковића на Физичком факултету Универзитета у Београду, др Жарка Бодрошког на Природно-математичком

факултету Универзитета у Новом Саду, др Николе Продановића на Универзитету у Лидсу, Велика Британија, као и др Марка Младеновића на Електротехничком факултету Универзитета у Београду.

3. Др Слободан Врховац је био ментор докторских дисертација Данице Стојиљковић и Јулије Шћепановић, одбрањених на Физичком факултету Универзитета у Београду.
4. Др Дарко Танасковић је ментор у изради докторске дисертације Петра Митрића на Физичком факултету Универзитета у Београду. Он је био ментор докторских дисертација др Willem-Victor van Gerven Oei-a, др Јакше Вучичевића и др Милоша Радоњића одбрањених на Физичком факултету Универзитета у Београду.
5. Др Саша Лазовић је био ментор докторске дисертације др Татјане Митровић одбрањене на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду.
6. Др Зорица Јакшић је била ментор докторске дисертације Светлане Живковић одбрањене на Физичком факултету Универзитета у Београду.
7. Др Игор Станковић је био ментор докторских дисертација др Миљана Дашића на Физичком факултету Универзитета у Београду и др Милана Жежеља на Електротехничком факултету Универзитета у Београду
8. Др Ивана Васић је била ментор докторске дисертације др Ане Худомал одбрањене на Физичком факултету Универзитета у Београду.
9. Др Марија Митровић Данкулов је ментор у изради докторских дисертација Ане Вранић и Дарје Цветковић на Физичком факултету Универзитета у Београду. Она је била ментор докторске дисертације др Јелене Смиљанић одбрањене на Електротехничком факултету Универзитета у Београду.
10. Др Игор Франовић је био ментор докторске дисертације др Иве Бачић одбрањене на Физичком факултету Универзитета у Београду.
11. Др Милан Радоњић је био ментор докторске дисертације др Анђела Мађитија одбрањене 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 дисертација др Willem-Victor van Gerven Oei-a, др Ане Худомал, др Иве Бачић, др Милоша Радоњића и др Александре Димић на Физичком факултету Универзитета у Београду, др Јелене Смиљанић и др Марка Младеновића на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, др Жарка Бодрошког на Природно-математичком факултету Универзитета у Новом Саду, као и др Ане Капларовић-Малишић на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу.
2. Др Ненад Вукмировић је био члан комисије за одбрану докторске дисертације др Јакше Вучичевића на Физичком факултету Универзитета у Београду.
3. Др Слободан Врховац је био члан комисије за одбрану докторске дисертације др Светлане Живковић на Физичком факултету Универзитета у Београду.
4. Др Ивана Васић је била члан комисија за одбрану докторске дисертације др Душана Вудраговића 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 Ненад Вукмировић је ангажован као наставник за предмет Методе квантне теорије поља у физици кондензоване материје (ФИЗДФКМ3)

3. Др Ненад Вукмировић је ангажован као наставник за предмет Компјутерско моделовање структурних и електронских особина материјала (ФИЗДФКМ16)
4. Др Милица Миловановић је ангажована као наставник за предмет Квантна теорија поља у физици нискодимензионалних система (ФИЗДФКМ2)
5. Др Милица Миловановић је ангажована као наставник за предмет Физика суперпроводности (ФИЗДФКМ10)
6. Др Дарко Танасковић је ангажован као наставник за предмет Физика суперпроводности (ФИЗДФКМ10)
7. Др Дарко Танасковић је ангажован као наставник за предмет Електронски транспорт у јако корелисаним системима (ФИЗДФКМ15)
8. Др Ивана Васић је ангажована као наставник за предмет Методе квантне теорије поља у физици кондензоване материје (ФИЗДФКМ3)
9. Др Ивана Васић је ангажована као наставник за предмет Квантне течности (ФИЗДФКМ13)
10. Др Игор Франовић је ангажован као наставник за предмет Физика неуређених система (ФИЗДФКМ5)

Ужа научна област: Квантна, математичка и нанофизика

1. Др Антун Балаж је ангажован као наставник за предмет Квантна механика сложених система (ФИЗДФКН9)

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

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 Антун Балаж, др Ана Худомал, др Душан Вудраговић, др Владимир Лончар, др Милан Радоњић, др Марија Јанковић, др Слободан Првановић
Студенти докторских студија: Марија Шиндик (ментор др Антун Балаж), планира се ангажовање нових студената

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 се фокус са слабих интеракција померио на јаке локалне интеракције, дугодометне и анизотропне дипол-дипол интеракције, као и улогу квантних флукуација на стабилност система. Експериментални и теоријски напредак у области ултрахладних атома приближава ове системе универзалним квантним симулаторима. Могућност велике експерименталне контроле довела је до тога да се

данас коришћењем хладних атома траже одговори на важна отворена питања из повезаних области физике. Поред тога у модерним експериментима са хладним атомима се разматрају опште теме квантне механике, као што је неравнотежна динамика изолованог квантног система, и теорије кондензованог стања, као што су постојање, особине и експериментална реализација суперсолидних система. Сви ови искораци су од великог значаја за развој и примену квантне технологије и квантних рачунара.

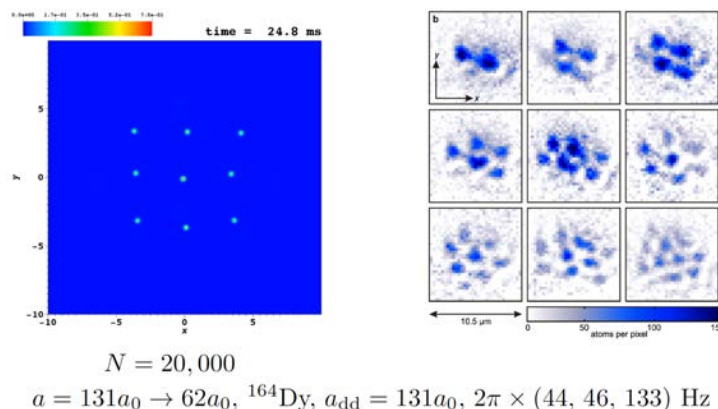
Сем бозонских, разматрају се и фермионски атоми, а недавно су реализована и јака синтетичка магнетна поља за ове системе. Поред тога, и неуређеност ових система се може добро контролисати, чак и на динамички начин. Сви ови елементи – различите врсте интеракција, магнетна поља, различита статистика (бозонска или фермионска), контролисана неуређеност – пружају могућност за проналажење и испитивање нових квантних фаза.

Динамика хладних атома је значајна из више разлога. Релевантне временске скале су значајно дуже него у аналогним системима физике кондензоване материје. Због тога се одговор система на спољашње пертурбације, који се нпр. користи за детекцију квантних стања, мора детаљно анализирати. Сем тога, добра изолованост ових система значи да је могуће проучавање механизма термализације у изолованом систему, односно налажење нетривијалних режима у којима је термализација спора. 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

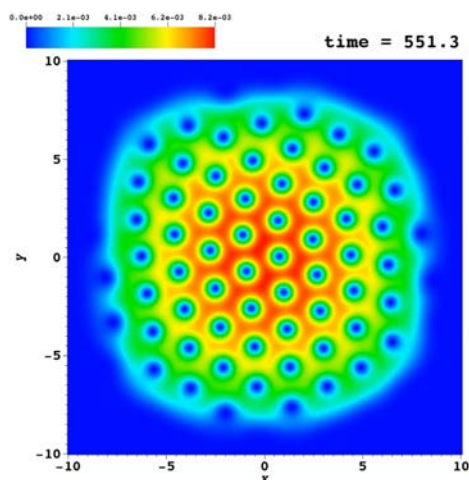
Присуство дугодометних дипол-дипол интеракција у ултрахладних бозонским системима на значајан начин мења њихове особине, а посебно колективне моде и стабилност система. На значајан начин се мења и одговор система на спољашњу побуду. У случају јаких дипол-дипол интеракција систем постаје нестабилан на нивоу теорије средњег поља, али је експериментално показано да квантне флукуације могу да доведу до стабилизације система и појаве квантних капљица (дроплета), као на слици 1.1. Овај феномен се може моделирати узимајући у обзир диполни аналогон Ли-Хуанг-Јанг квантних корекција хемијског потенцијала и губитка кондензата (condensate depletion).



Слика 1.1: Поређење резултата нумеричких симулација квантних капљица и експерименталних резултата добијених у систему Бозе-Ајнштајн кондензованог диспрозијума у режиму јаких дипол-дипол интеракција.

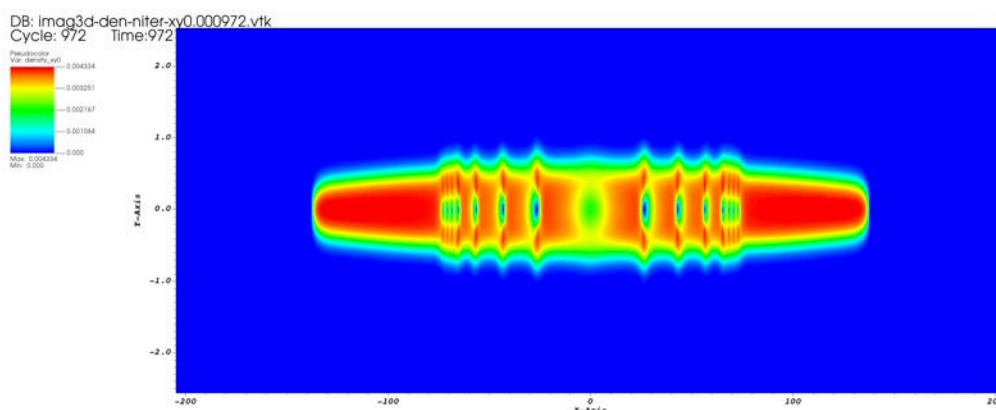
У оквиру ове теме проучаваћемо квантне флукуације за диполне системе са јаком интеракцијом и утицај градијентних корекција код нехомогених система. Проучаваћемо

и формирање вортекса (слика 1.2), као и утицај дипол-дипол интеракције на њихов облик и структуру. Посебна тема биће генерисање несиметричних вортекса у реалистичним експерименталним системима.



Слика 1.2: Нумеричка симулација настанка Абрикосов решетке вортекса у брзо ротирајућем Бозе-Ајнштајн кондензату.

Посебно ћемо се бавити особинама суперсолидних система који се могу формирати од квантних капљица у квази-1Д и квази-2Д системима, укључујући системе тороидалног облика. У оквиру ове теме ћемо детаљно изучавати брзо ротирајуће квантне капљице, као и могућност формирања вортекса у њима (слика 1.3), што је по први пут експериментално потврђено током 2022. године.



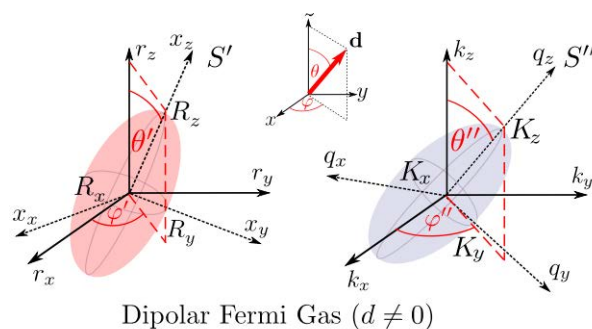
Слика 1.3: Нумеричка симулација брзо ротирајуће квантне капљице са локализованим вортексима.

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 KRb са великим перманентним електричним диполним моментом, отварају врата експерименталном истраживању ултрахладних фермиона у јако диполном режиму.

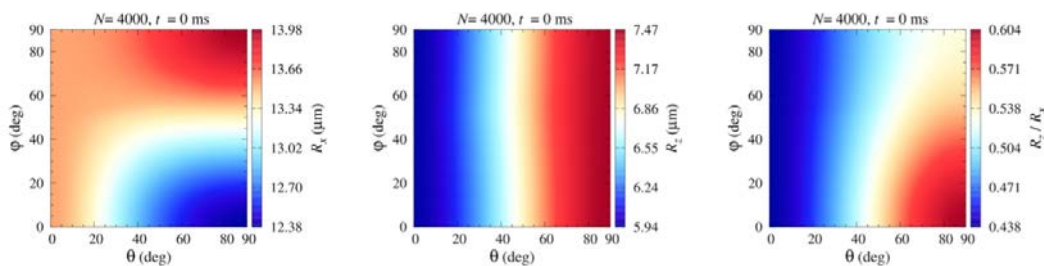
У оквиру ове теме ћемо проучавати системе поларних молекула са јаким електричним диполним моментима користећи квантну Болцманову једначину за Вигнерову функцију. Код идеалног фермионског гаса се Вигнерова функција може моделирати помоћу сфере

у k -простору и елипсоида одређеног у потпуности обликом хармонијске замке у реалном простору. У присуству дипол-дипол интеракције са произвољном оријентацијом ситуација је много комплекснија (слика 1.4).



Слика 1.4: Облик ултрахладног фермионског гаса у реалном простору (лево) и у k -простору (десно, Ферми површ). Деформација обе површи је изазвана присуством диполне интеракције.

У оквиру ове теме ћемо развити паралелни алгоритам и програме за решавање квантне Болцманове једначине која обезбеђује реалистично моделирање оваквих система. Овај приступ ћемо онда искористити за проучавање јако интерагујућих система поларних молекула, укључујући и динамику и колективне моде. Крајњи циљ је разумевање ефеката који зависе од облика Ферми површи, где долази до формирања Куперових парова. Деформација Ферми површи доводи до промене критичне температуре система, као и других експериментално мерљивих особина, као што је величина система (слика 1.5).



Слика 1.5: Зависност величине облака ултрахладног фермионског гаса од угаоне оријентације диполних момената молекула.

Тема 1.3: Бозонски транспорт у оптичким решеткама

Оптичке решетке се у системе хладних атома уводе употребом ласерске светлости. На овај начин могуће је испитивати стандардне моделе који се проучавају у физици кондензоване материје, као што је Хабард модел, користећи атоме у периодичном оптичком потенцијалу. Значајна предност хладних атома је једноставност подешавања јачине интеракције, што је искоришћено за експерименталну потврду квантног фазног прелаза између атомског Мот изолатора и Бозе-Ајнштајн кондензата.

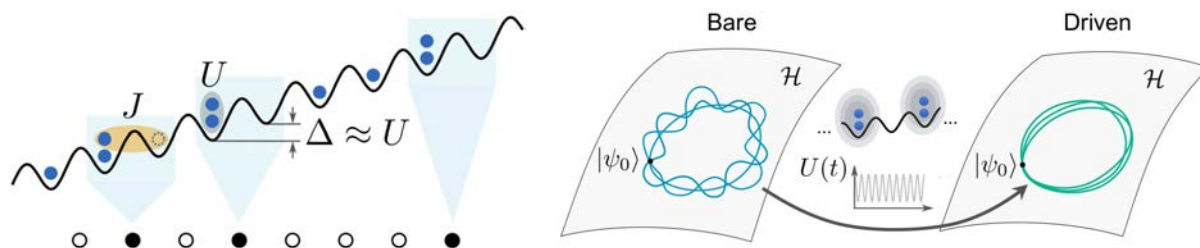
Фокус новијих експеримената је на налажењу динамичких протокола којима се мере физичке величине типичне за експерименте са реалистичним материјалима, као што су нпр. струја и проводност. У складу са тим, применом егзактних нумеричких метода у оквиру теорије линеарног одзива, проучаваћемо оптичку проводност бозона за различите јачине интеракције на коначној температури.

Транспортна мерења су важна и за проучавање Холовог ефекта у оптичким решеткама. За разлику од електрона, атоми су ненаелектрисане честице, па се магнетна поља реализују посредно – периодичним вођењем система. Као први корак тек недавно је

реализовано Лафлиново стање за два бозона [Leonard et al., arXiv: 2210.10919]. Како би се овај резултат уопштио на веће системе, неопходно је одредити оптимални режим параметара у ком је загревање система услед вођења довољно споро да би припрема и мерење Лафлиновог стања били експериментално изводљиви. У ту сврху развијаћемо нумеричке кодове и симулираћемо оптимизоване протоколе узимајући у обзир пун динамички опис система. Испитаћемо када резултати добијени апроксимацијом линеарног одзива заиста описују пун одговор система на спољашњу пертурбацију.

Тема 1.4: Неравнотежна динамика у системима ултрахладних атома

Једно од важних питања у области квантне физике је питање термализације изолованог система у општем случају. Уобичајено је да се у неинтеграбилним квантним системима сва почетна стања брзо термализују, у складу са предвиђањима хипотезе о термализацији путем својствених стања (eigenstate thermalization hypothesis). Међутим, недавни експерименти у којима су извођене квантне симулације на нивовима Ридбергових атома довели су до изненађујућих резултата – за одређене почетне конфигурације систем се неочекивано споро термализовао [Bernien et al., Nature **551**, 579 (2017)]. Уместо да брзо достигне потпуно термализовано стање у коме је густина хомогена, систем се периодично враћао у своје почетно стање и измерене су дуготрајне осцилације густине. Такво понашање је убрзо теоријски објашњено постојањем такозваних квантних вишечестичних ожиљака (quantum many-body scars) у ефективном РХР моделу који описује јако интерагујуће Ридбергове атоме [Turner et al., Nat. Phys. **14**, 745 (2018)]. То су посебна својствена стања која одликује неуобичајено ниска ентропија увезаности. Равномерно су распоређена по читавом енергетском спектру, али се очекиване вредности одређених опсервабли у овим стањима значајно разликују од очекиваних вредности других својствених стања са приближно истом енергијом, што је у супротности са хипотезом о термализацији путем својствених стања. Ово откриће је довело до развоја нове и веома активне области истраживања, а квантни ожиљци су пронађени и у другим типовима система. Међутим, многа питања у овој области су и даље отворена, као на пример која својства система гарантују појаву квантних ожиљака. Боље разумевање феномена квантних ожиљака могло би да омогући циљану конструкцију модела са спором термализацијом, што би имало примену у областима као што су реализација и проучавање тополошких фаза материје, квантни сензори и квантно рачунарство.

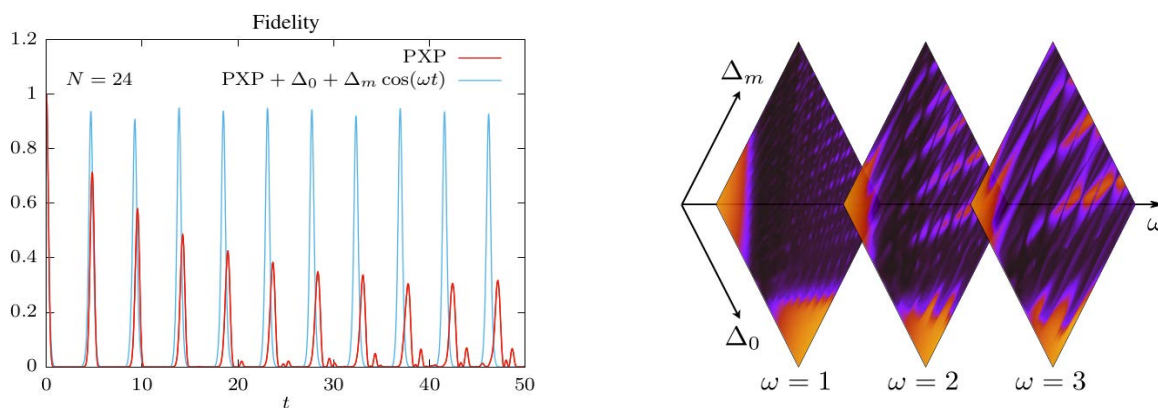


Слика 1.6: Пресликавање између Бозе-Хабард модела са линеарним нагибом и РХР модела (лево) и ефекат периодичне модулације јачине интеракција (десно) [Su et al., у припреми].

Иако је досада откривен велики број теоријских модела који садрже квантне вишечестичне ожиљке, низови Ридбергових атома су до скоро били једина експериментална платформа на којој је било могуће реализовати и испитивати овај феномен. Због тога је важно проналажење нових експерименталних модела. Добри кандидати су системи ултрахладних атома у оптичким решеткама, који се већ годинама рутински реализују у великом броју лабораторија и посебно су погодни за проучавање неравнотежних квантних феномена. У сарадњи са теоријском групом са Универзитета у

Лидсу и експерименталном групом са Универзитета у Хајделбергу радићемо на реализацији квантних ожилјака на Бозе-Хабард квантном симулатору. Може се показати да је Бозе-Хабард модел са додатком линеарног потенцијала у одређеном резонантном режиму еквивалентан претходно поменутом РХР моделу (слика 1.6). Поред раније познатих специјалних почетних конфигурација, испитиваћемо и друга почетна стања која доводе до атипично споре термализације. Наша досадашња истраживања показују да постоји континуална фамилија таквих стања, а разматраћемо и могући протокол за њихову припрему у експерименту.

Новији експерименти на Ридберговим атомима показали су да је ефекте квантних вишечестичних ожилјака могуће додатно појачати коришћењем периодичног вођења [Bernien et al., *Science* **371**, 1355 (2021)]. Уз оптималан избор фреквенције и других параметара вођења, долази до значајног повећања амплитуде и времена трајања осцилација густине. Такав ефекат се може постићи периодичном модулацијом јачине интеракција у нашем Бозе-Хабард моделу са линеарним нагибом (слика 1.6), што ће бити и експериментално испитано. Досадашња теоријска разматрања механизма стабилизације квантних ожилјака уз помоћ периодичног вођења била су фокусирана на РХР модел (слика 1.7) [Hudomal et al., *Phys. Rev. B* **106**, 104302 (2022)]. У оквиру ове теме, бавићемо се и могућношћу примене ове методе на друге теоријске моделе са квантним вишечестичним ожилјцима, као што су бозонски модел са корелисаним тунеловањем [Hudomal et al., *Commun. Phys.* **3**, 99 (2020)] и Ферми-Хабард модел са линеарним нагибом [Desaules et al., *Phys. Rev. Lett.* **126**, 210601 (2021)]. Иако су ова два модела наизглед слична већ поменутом Бозе-Хабард моделу са нагибом, који је еквивалентан РХР моделу, механизми настанка квантних ожилјака у њима су потпуно различити од тог модела, као и међусобно. Због тога ће ово истраживање захтевати проналажење одговарајућих временски зависних чланова које треба додати Хамилтонијану и одређивање оптималних параметара периодичних модулација.



Слика 1.7: Појачање и стабилизација ефеката квантних вишечестичних ожилјака у РХР моделу коришћењем периодичног вођења (лево) и претраживање простора параметара у потрази за оптималним вредностима (десно) [Hudomal et al., *Phys. Rev. B* **106**, 104302 (2022)].

Потпројекат 2: Јако корелисани квантни системи

Руководилац: др Јакша Вучичевић

Учесници: др Јакша Вучичевић, др Милица Миловановић, др Михаило Чубровић, др Соња Предин

Студенти докторских студија: Владан Гецин (ментор др Михаило Чубровић), планира се ангажовање нових студената

Физика корелиција између великог броја квантних честица је релевантна за две велике групе система:

- 1) тзв. јако корелисане материјале са кристалном структуром, као што су купрати, капа-органици, оксиди прелазних елемената, као и симулатори ових система, остварени помоћу "уврнутих" двослоја или оптичких решетки са ултрахладним атомима, и
- 2) спојеве полупроводника где се остварује ефективно дводимензиони систем електрона ван утицаја периодичног потенцијала који карактерише кристалне структуре.

Обе групе система имају и важне индустријске примене, али за науку првенствено представљају савршен полигон за изучавање фундаменталних особина кондензоване материје. Проблем више квантних честица је један од најтежих у физици и нерешив је у општем случају. Стога је важан развој нумеричких метода и аналитичких приступа који могу дати увид у питања уређених и егзотичних стања у које горепоменути системи често ступају. Овај развој се не одвија само у оквирима квантне теорије поља, већ и у оквирима теорије гравитације, где је могуће наћи дуале квантним теоријама, који су често лакши за решавање. Постоји и низ концептуалних питања, нарочито везаних за теорију информација и хаотичну динамику које је потребно изучавати у ширем оквиру, који укључује и квантне теорије и гравитацију.

У оквиру овог потпројекта, рад ће се одвијати у оквиру три целине. У првој целини акценат ће бити на развоју и употреби нумеричких метода за решење интерагујућих модела решетке. У другој целини, изучавање се питања дводимензионалног електронског гаса подвргнутог јаким магнетним пољима, примарно везана за фракциони квантни Холов ефекат. У трећој целини, бавићемо се питањима теорије информације, хаоса, и холографских дуала квантних теорија.

Истраживања у оквиру овог потпројекта представљаће основу за докторски рад Владана Гецина.

Тема 2.1: Нумерички егзактан приступ транспорту у јако корелисаним системима

Једно од главних тема у контексту физике јаких електронских корелација је високотемпературна суперпроводност. Најбољи пример ове појаве су једињења на бази купрата. Суперпроводност у многим од ових материјала се опажа и на температури реда 100 К. Већина купратних једињења се понаша на сличан начин, тј. испољавају универзални фазни дијаграм. Међутим, критична температура за суперпроводност може пуно да се разликује између два једињења. Тренутно је нејасно које то кристалне и хемијске особине купрата одређују висину критичне температуре. Актуелна је хипотеза да је суперпроводност у купратима у вези са квантном критичношћу, коју експериментално није могуће опазити директно, управо због ступања система у суперпроводну фазу. Показатељ ове квантне критичности се сматра да је линеарна зависност отпора од температуре на температури изнад критичне, тзв. фаза чудног метала. Поставља се питање да ли Хабардов модел, који се користи за опис отпорности купратних једињења на високој температури, има квантну критичну тачку, и да ли би се тренд линеарне зависност отпора од температуре у овом моделу наставио до нулте температуре. Истраживање у овом смеру је ограничено могућностима нумеричких метода за решавање Хабардовога модела и прорачун његових динамичких одзива.

У нашем скорашњем раду, развили смо нови нумерички метод, дијаграматски Монте Карло у домену реалне фреквенце, који би требало да омогући прорачуне отпорности у Хабардовом и другим, општијим моделима, на ниској температури и у присуству магнетних поља. У наредних пет година, планирамо да даље унапредимо и развијемо овај метод и применимо га на испитивање феноменологије транспорта у Хабардовом и

сродним моделима, како би смо одговорили на питања везана за суперпроводност у купратним једињењима. Циљеви рада биће следећи:

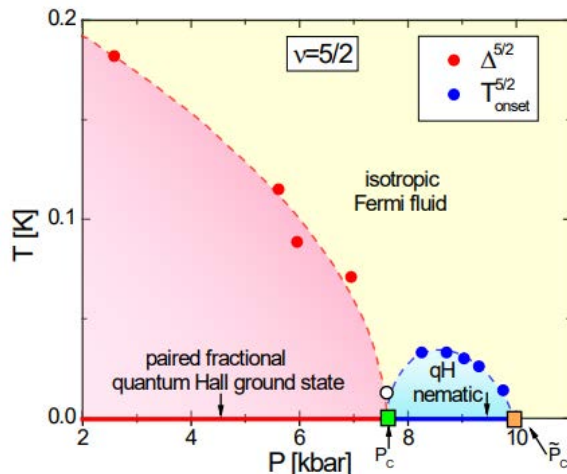
- 1) да се израчуна проводност у Хабардовом моделу на ниској температури, како бисмо испитали постојање квантне критичне тачке на коначном допингу и при умереној и великој вредности константе интеракције између електрона;
- 2) да се израчуна проводност у Хабардовом моделу у присуству магнетног поља, како бисмо објаснили скорашње експерименте на купратима. Неки од ових експеримената указују на одсуство праве квантне критичне тачке, и дају слику приближне критичности у већем опсегу допинга. Изучаваћемо такође и феноменологију Браун-Зак осцилација, што је тек однедавно познат макроскопски квантни феномен на собној температури, у директној вези са процесима расејања електрона.
- 3) да се израчуна проводност у генерализаном Хабардовом моделу, како би се испитао утицај различитих механизма расејања на проводност, и на тај начин помогло у интерпретацији експерименталних резултата. Нарочито ћемо се фокусирати на ефекте неуређености и електрон-фонон интеракције. Купрати су нужно неуређени системи, јер допирање управо доводи до сламања стехиометрије, а на високим температурама се очекује да ефекти фонона буду значајни.
- 4) да се систематски испита зависност критичне температуре за суперпроводност од геометријских параметара Хабардовог модела. Такође, испитиваћемо ефекте учешћа кисеоникових орбитала у проводној енергетској зони купрата на висину критичне температуре. Ово ћемо покушати да моделирамо ефективним једно-зонским моделом са генерализаним интеракцијама.
- 5) да се развије пакет програмских кодова за прорачуне методом дијаграматског Монте Карла у домену реалне фреквенције.
- 6) да се систематски испита простор трансформација пертурбативног реда формулисаног по степенима константе интеракције, како бисмо открили оптималан облик за величину радијуса конвергенције. Овај део рада је значајан за применљивост методе дијаграматског Монте Карла у режиму параметара Хабардовог модела релевантног за купрате.

Тема 2.2: Ефективне теорије електронског гаса у две димензије под утицајем магнетног поља

У оквиру ове теме бавићемо се описом система фракционог квантног Холовог ефекта (ФКХЕ) – системима електрона у ефективно две димензије у присуству јаког магнетног поља. Магнетно поље је толико јако да омогућава опис система унутар једног Ландау нивоа (тј. карактеристична енергија орбиталног кретања електрона се не мења под утицајем интеракције са другим електронима). Изузетне корелације, утицај интеракција може се догодити у тзв. полупопуњеним системима када је број електрона у односу на број дозвољених орбитала у простору полуцео број. Ефективно један Ландау ниво је полупопуњен и систем у најнижем Ландау нивоу може да се опише као Ферми течност диполних квазичестица. У првом вишем Ландау нивоу претпоставља се спаривање тих квазичестица које води, очекује се, тополошким фазама – Фафијан стањима са изузетном неабеловском статистиком. Наш рад ће обухватити:

- 1) развој диполне репрезентације за полупопуњене системе (пре свега најнижег Ландау нивоа). Користићемо аналитички прилаз унутар Ландау нивоа са посебном везом – условом који уважава симетрију на измену честица и шупљина у полупопуњеном Ландау нивоу. Такође, захтеваћемо тзв. boost инваријантност описа тј. да промена импулса у систему само са интеракционом енергијом не доводи до промене енергије. Извешћемо и проучавати квантну Болцманову

једначину за квазичестице – диполе које учествују у изградњи Ферми течности; разматраћемо колективне ексцитације и (Померанчук) нестабилности Ферми сфере. На слици 2.1 је дат фазни дијаграм електронског система, на пуњењу $5/2$, са значајном физиком у вишем (другом) Ландау нивоу. Физика дипола се природно може повезати са уређеним фазама; преко p -wave (Фафијан) спаривања квазичестица у систему ФКХЕ и стварањем анизотропне Ферми површине и тиме нематичке фазе.



Слика 2.1: Преузето из Schreiber, Csathy, *Ann. Rev. Cond. Mat. Phys.* **11**, 17 (2022).

- 2) детаљан опис Фафијанских стања са увидом у механизме њиховог стварања. На основи развијене диполне репрезентације квазичестица, уз пажљиво увођење веза и сламање честица- шупљина симетрије описаћемо микроскопски механизам за стварање Фафијанских стања. Избор наметнутих веза представљаће слаб или јак утицај осталих Ландау нивоа, и појаву одговарајућих Фафијан стања. Тиме ћемо идентификовати ефективни Хамилтонијан који подржава тзв. PH Pfaffian чије карактеристике се виде у најновијим, усавршеним експериментима [Banerjee et al., *Nature* **559**, 205 (2018); Dutta et al., *Science* **375**, 193 (2022)].
- 3) проучавање Куперовог спаривања и суперпроводности у flat-band системима. Разматрањем спаривања у Ландау нивоима - најједноставнијим flat-band системима, можемо доћи до услова неопходних да се створи триплет спаривање у нетривијалним (са ненултим Черновим бројем), реалистичним flat-band системима, у одсуству спољашњег магнетног поља, као што су графенски системи са више заротираних (twisted) слојева. Први циљ би био разумевање спаривања у вишекомпонентним системима ФКХЕ на основи развијене диполне репрезентације тј. аналитичког прилаза за више (два) Ландау нивоа, а затим уопштавање за системе електрона на нетривијалним кристалним структурама, у одсуству магнетног поља.

Тема 2.3: Јако корелисани системи и гравитација

Недавна открића у вези проблема информације црних рупа, као и све реалистичнији холографски модели јако корелисаних електронских система упућују на стварање јединственог приступа за разумевање кључних питања јако корелисане динамике на свим скалама, од струна до метала. Главна питања нашег будућег рада биће следећа: разумевање хаоса и транспорта информација у црним рупама на микроскопском нивоу у оквиру матричних модела; веза квантног хаоса са класичним хаосом, статистиком у фазном простору и особинама партиционих функција; структура и динамика црних рупа са нехомогеним и периодичним хоризонтом и примена на јако корелисане електроне на решеткама.

Матрични модели (BFSS и ИККТ) омогућавају рачунање микростања и праћење динамике оператора за конфигурације које одговарају црним рупама. У до сада извршеним рачунима на ИККТ моделу показали смо да, када се укључе квантне флукуације, црна рупа никада не достиже чак ни локалну термодинамичку равнотежу и може да еволуира у микростање битно различито од квазикласичног решења опште релативности. Даља примена оваквог приступа, заснованог на проучавању временски неуређених корелационих функција (енг. out-of-time ordered correlators) матричних модела, омогућиће нам да завиримо у квантни опис црних рупа, Хокинговог зрачења и његових дистантних корелација са црном рупом, јер процес Хокинговог зрачења одговара напросто еволуцији BFSS/ИККТ матрица у блок-дијагоналну форму. Покушаћемо такође да црну рупу моделирамо неким једноставним квантним колом као што су зидарска кола (енг. brickwork circuits) и да на тај начин видимо у којој мери се микростање црне рупе може реконструисати из њеног зрачења.

Још једно важно питање, потенцирано проблемом информације црних рупа, јесте веза хаотичне динамике са факторизацијом партиционих функција репликованих система. Наиме, слично неуређеним системима са залеђеним нечистоћама (енг. quenched disorder), рачун партиционе функције црне рупе такође подразумева множење свију реплика. Ту се јављају просторвременске црвоточине, решења која повезују различите реплике, а партициона функција се због њих не факторизује у производ појединачних реплика. До сада смо показали да у ИККТ матричном моделу факторизација ипак важи за термодинамички преферирано стање, и да је то уједно стање које има хаотичну расподелу енергетских нивоа (тј. повинује се Вигнер-Дајсоновој статистици). Сада радимо на партиционим функцијама високопобуђених струна, као и на амплитудама њиховог расејања. Желимо да видимо да ли између регуларног/хаотичног понашања амплитуде и (не)факторизације партиционе функције постоји веза, и да ли се ту види очекивани фазни прелаз из струнског флукуитајућег решења у квазистатичко решење које одговара црној рупи. Ту се логично појављује и питање динамике у позадини просторних (не просторвременских) црвоточина, које одговарају квантој телепортацији. А иста питања постављају се и у експериментално доступним системима, конкретно у Бозе-Хабардовом моделу, остваривом путем хладних атома. Наша прелиминарна испитивања указују на везу аномалног транспорта са тунелирањем и нефакторизацијом партиционих функција коју желимо боље да разумемо.

Напоследку, старо питање холографског дуала како чудних метала тако и стабилних Ферми течности остаје актуелно, али је сада освежено постојањем поузданих нумеричких метода за конструкцију холографских решетки. Наша конструкција 2Д решетке у Ајнштајн-Максвел-дилатон моделу даје наду да се елементи реалне физике чудних метала (нпр. купрата) могу разумети путем AdS/CFT кореспонденције. У том циљу, сада желимо да се донекле вратимо унатраг и да нумеричке методе које смо развили применимо на математички што доступније случајеве: CFT на решетки (на нултом хемијском потенцијалу и температури, добијен као дуал неутралне црне рупе у присуству нехомогеног дилатона) и локално критични метал на решетки (добијен као дуал наелектисане црне рупе са нехомогеним електричним пољем, без дилатона). Тако ћемо добити аналитичко разумевање лекција које холографија пружа за електроне на решетки – чак и ови једноставни случајеви битно се разликују од уџбеничке теорије слабе/јаке везе због јаких интеракција. Затим ћемо прећи на Латинцерову теорему у холографским чудним металима, која је вероватно нарушена али наш модел дозвољава да се тачно идентификују не-квазичестични степени слободе који носе недостајуће наелектрисање. Такође ћемо покушати да, уз помоћ нумеричких и семианалитичких резултата, разумемо понашање сопствене енергије у Мотовим изолаторима и да на тај начин у контролисаној теорији мотивишемо и прецизирамо оквир постављен у скорашњим радовима Филипса и сарадника.

Потпројекат 3: Поларони у моделним системима и реалним материјалима

Руководилац: др Ненад Вукмировић

Учесници: др Ненад Вукмировић, др Дарко Танасковић, др Вељко Јанковић, др Наташа Ацић

Студенти докторских студија: Милан Јоцић (ментор др Ненад Вукмировић), Сузана Миладић (ментор др Ненад Вукмировић), Петар Митрић (ментор др Дарко Танасковић)

Физички процес због кога функционишу све електронске компоненте у уређајима које користимо свакодневно, као што су нпр. рачунари, мобилни телефони, фрижидери, телевизори, ЛЕД сијалице и соларни панели, је проток струје кроз материјал. Електронске компоненте су најчешће направљене од полупроводничких материјала у којима су носиоци струје негативно наелектрисани електрони и позитивно наелектрисане шупљине. Док ови носиоци путују кроз материјал, они интерагују са атомима у материјалу који осцилују око својих равнотежних положаја. Квазичестица која настаје услед ове интеракције се назива поларон. Састоји се од електрона (или шупљине) и фонона - кваната осцилација атома који се налазе у окружењу. Као последица тога, кретање поларона одређује електричну проводност материјала и карактеристике електронских компоненти заснованих на том материјалу. И поред тога што су електронске компоненте толико заступљене у свакодневном животу, и даље не постоји поуздани начин да се предвиди покретљивост датог материјала кад знамо његову кристалну структуру.

С обзиром на важност разумевања својстава поларона у материјалу, у оквиру овог потпројекта планирамо да развијемо методе које ће омогућити да се предвиди покретљивост поларона у кристалном материјалу, да примењујемо те методе да проучимо транспорт поларона у моделним системима и реалним материјалима и да класификујемо и разумемо различите режиме транспорта наелектрисања у проучаваним системима.

Истраживање у овом потпројекту ће бити обављено у оквиру следећих тема.

Тема 3.1: Нумерички егзактни прорачун својстава поларона за моделне Хамилтонијане

У оквиру ове теме проучаваћемо репрезентативне моделне Хамилтонијане са циљем да за њих добијемо нумерички егзактна решења за покретљивост носилаца. Ситуација у литератури је тренутно таква да су за ове Хамилтонијане типично позната решења само за основно стање или очекиване вредности неких статичких величина на коначној температури. Јако мало тога је урађено на рачунању корелационих функција у реалном времену које су неопходне да би се одредила покретљивост материјала. Неки од резултата на ту тему су засновани на аналитичком продужењу података из имагинарног времена у реално време, што је веома непоуздан приступ.

За моделне Хамилтонијане рачунаћемо електронске спектралне функције, струја-струја корелациону функцију, као и статичку и динамичку проводност. Модели које ћемо разматрати су Холштајнов модел који садржи локалну електрон-фонон интеракцију, Пајерлсов модел са краткодметном нелокалном електрон-фонон интеракцијом и Фролихов модел који садржи дугодметну електрон-фонон интеракцију.

Проблем електрона који интерагује са фононима и креира поларон је изузетно тежак многочестични проблем и не постоји један метод који би био успешан за све моделе које ћемо разматрати и за све релевантне вредности моделних параметара. Из тог разлога, применићемо неколико различитих метода при проучавању ових модела: метод хијерархијских једначина кретања, квантни Монте Карло метод заснован на интегралима по трајекторијама, као и метод егзактне дијагонализације за системе који су довољно мали да се могу тако третирати.

Тема 3.2: Развој приближних и рачунски ефикасних метода за прорачун својстава поларона

У оквиру ове теме циљ је да се развију приближни, али рачунски ефикасни методи који ће омогућити да проучавамо сложеније Хамилтонијане који описују реалне материјале. Ове методе ћемо најпре применити на Хамилтонијане за које имамо нумерички егзактна решења, чиме ћемо моћи да утврдимо домен њиховог важења и унапредимо их ако је потребно. Методе које планирамо да разматрамо су следеће:

- 1) Метод заснован на унитарној трансформацији Хамилтонијана. Ово је метод који смо недавно развили и досад смо га применили на Холштајнов Хамилтонијан и верзију Фролиховог Хамилтонијана на решетки. Основна идеја метода је да се примени унитарна трансформација Хамилтонијана која ће га довести у облик у коме се интерагујући део може третирати пертурбативно. Планирамо да добијене резултате упоредимо са резултатима нумерички егзактних метода и тако утврдимо тачност овог метода. Након тога ћемо размотрити могућност примене метода на реалне материјале.
- 2) Метод заснован на кумулантној експанзији. Метод је заснован на идеји да се ретардована Гринова функција представи као производ неинтерагујуће Гринове функције и експонента функције коју називамо кумулантом. У оквиру ове теме планирамо најпре да нумерички имплементирамо метод, а затим да упоредимо резултате које добијамо са нумерички егзактним резултатима. У зависности од добијених резултата и за овај метод ћемо размотрити могућност примене на реалне материјале.
- 3) Теорија динамичког средњег поља (DMFT). Недавно смо показали да DMFT даје одличне спектралне функције за Холштајнов модел. Планирамо даље да размотримо какве резултате даје DMFT кад је у питању покретљивост носилаца у оквиру Холштајновог модела. У каснијој фази потпројекта размотрићемо и могућности примене DMFT на системе код којих електрон-фонон интеракција није локална.

Тема 3.3: Проучавање поларона и ефеката електрон-фонон интеракције у реалним материјалима

У оквиру ове теме проучаваћемо реалне материјале у којима су поларонски и ефекти електрон-фонон интеракције значајни. У почетним фазама рада на пројекту проучаваћемо материјале у којима је пертурбативни приступ задовољавајући. Циљ у каснијим фазама пројекта ће бити да се проучавају материјали у којима је електрон-фонон интеракција довољно јака тако да су поларонски ефекти битни. Репрезентативни материјали које ћемо проучавати су халидни перовскитни материјали и TiO_2 . Параметре Хамилтонијана ћемо добијати из прорачуна заснованих на теорији функционала густине, а спектралне функције, температурна зависност енергетског процепа материјала и покретљивост поларона ће бити одређивани методама које су развијене у оквиру претходних тема.

Недавно смо развили рачунарски код који израчунава параметре електрон-фонон интеракције у произвољној тачки у Брилуеновој зони и на основу тога израчунава покретљивост електрона под претпоставком да се електрон-фонон интеракција може третирати пертурбативно. Овај код ћемо искористити и да извршимо параметризацију Хамилтонијана електрон-фонон интеракције за материјале где су поларонски ефекти значајни. Код ће потом бити повезан за кодовима који ће бити развијани у претходним темама, а који омогућавају рачунање покретљивости за дати Хамилтонијан. Добијени резултати за реалне материјале ће бити поређени са експериментима из литературе да би се утврдила исправност целог приступа. Могућа неслагања са експериментима ће бити пажљиво размотрена и искоришћена за евентуално унапређење целог приступа.

Тема 3.4: Развој метода за опис спектралних својстава моделних Хамилтонијана са електрон–фонон интеракцијом у присуству статичке неуређености

Ова тема је мотивисана потребом за развојем нумерички ефикасних и што тачнијих метода за израчунавање спектралних својстава молекуларних агрегата (нпр. апсорпциони спектри фотосинтетичких пигмент–протеин комплекса), код којих се динамика електронских екситација (екситона) моделира истим Хамилтонијанима као електрон–фонон интеракција у полупроводничким материјалима. Изазови који се том приликом срећу су (а) експлицитно нумеричко усредњавање по великом броју реализација статичке неуређености, која је најчешће гаусовског типа и (б) истовремен и подједнак третман интеракције са фононским модама појединачних молекула и фононским модама средине. Као одговор на изазов (а), развићемо формализам у којем се усредњавање по гаусовској неуређености спроводи аналитички и без увођења додатних апроксимација. У развијену егзактну аналитичку теорију ћемо потом уводити апроксимације и одређивати домен њихове примењивости поређењем са егзактним резултатима. Као одговор на изазов (б), генерализаћемо неке од приближних метода (метод развоја по кумулантима, теорија динамичког средњег поља), оригинално развијених за случај једне фононске моде, на случај сложене спектралне густине екситон–фонон интеракције. Централну улогу у тој генерализацији ће имати формализам дисипатонских једначина кретања којим се сложена спектрална густина своди на коначан број дисипатона који би се потом третирали неким од приближних метода. Коначно, најприкладнији приближни методи за третман гаусовске неуређености и сложене екситон–фонон интеракције ће бити комбиновани и примењени на моделне Хамилтонијане пигмент–протеин комплекса (нпр. LH2 комплекс). Рад на овој теми ће бити започет након што се добију најзначајнији резултати у моделима без неуређености у оквиру претходних тема.

Потпројекат 4: Нумеричко моделирање комплексних система

Руководилац: др Слободан Врховац

Учесници: др Слободан Врховац, др Зорица Јакшић, др Јулија Шћепановић, др Даница Стојиљковић, др Игор Станковић, др Миљан Дашић, др Александар Белић

Студенти докторских студија: планира се ангажовање нових студената

Тема 4.1: Ловац–плен (predator – prey) модели

Бавићемо се развојем модела типа ловац–плен (Л–П модел) који има сложена геометрију простора у коме се крећу аутономни агенти. Биће анализирана динамика Л–П модела у коме се кретање агената одиграва у простору у коме постоје препреке које ограничавају њихово кретање. У општем случају Л–П модел се састоји из (слика 4.1):

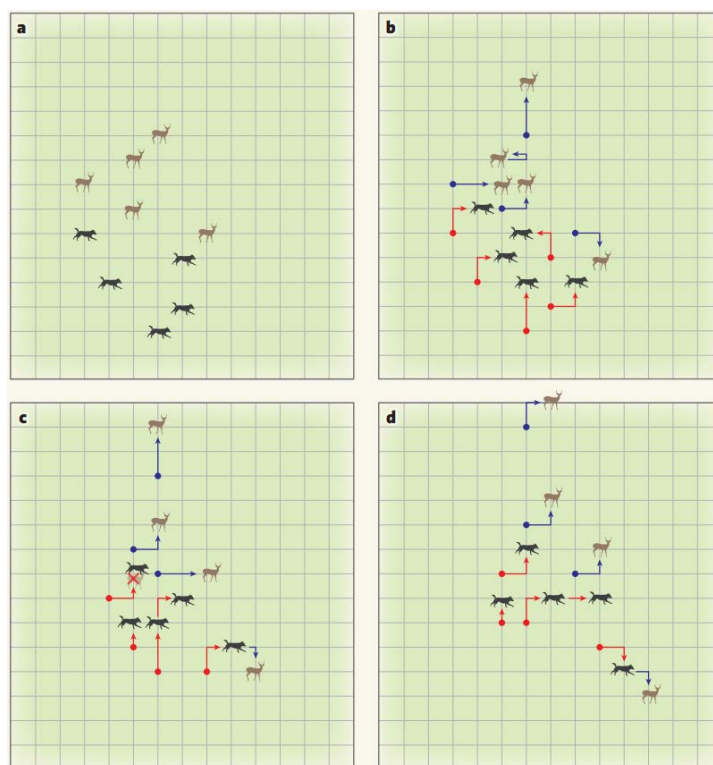
- а) честица (аутономних агената – индивидуалних или колективних ентитета) чији утицај на систем у целини проучавамо;

- b) правила одлучивања при њиховом кретању;
- c) процеса учења или адаптације;
- d) интеракција између честица;
- e) простора у који су честице смештене (континуум, решетка, мрежа, итд.).

Први Л-П модел предложен још 1920. године [А. Ј. Lotka, J. Am. Chemical Soc. 42, 1595 (1920)]. Он је описивао међусобну интеракцију различитих врста риба које живе у Јадранском мору и развијен је 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 (a) – (e), још и сложену геометрију простора у коме се крећу честице. Биће развијени Л-П модели у којима се кретање агената одиграва на станишту у коме постоје просторне препреке које ометају њихово кретање. Биће изграђено више Л-П модела на квадратној решетки који се разликују по степену сложености правила одлучивања приликом кретања предатора, односно плена.

У моделе ће бити уграђени различити алгоритми интелигентне потраге (предатора за пленом) и избегавања (плена од предатора). Обе врсте ће одлуке о свом кретању доносити на основу визуелне перцепције ограниченог домета. У модел ће бити имплементирани неконзервативни процеси којима се мења број јединки у популацији, као што је размножавање и физиолошко умирање јединки.



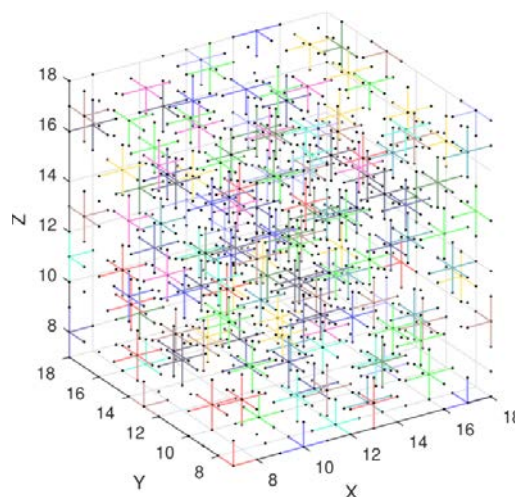
Слика 4.1: Ловци (вукови) и жртве (јелени) су иницијално смештени на случајна места (a). Они се крећу у складу са правилима које дефинише Л-П модел. Панели (a) - (d) приказују временску еволуцију система.

Примарна величина која ће бити анализирана је временска еволуција броја ловаца и жртава. Оне ће бити одређиване за разне облике и густине препрека. Биће могуће 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. Анализа временских серија које генерише модел биће извршена коришћењем wavelet анализе. Техником wavelet-а биће могуће детаљно анализирати осцилације броја ловаца и жртви у току времена. Примарни циљ ће бити анализа како на период и кохеренцију осцилација броја ловаца и жртви утиче присуство просторних препрека (њихов облик и густина).

Тема 4.2: Депозиција сложених објеката у тродимензионалном простору

Биће проучавана својства процеса случајне секвенцијалне адсорпције објеката разних облика и величина на тродимензионалној кубној решетки у присуству процеса дифузионе релаксације. Депоновани објекти представљају скупове тачака који се налазе у чворовима решетке, при чему се све тачке које чине објекат могу повезати као најближи суседи. Основни циљ истраживања ће бити анализа утицаја геометријског облика депонованих објеката на асимптотску густину паковања и на временску еволуцију густине депозита. Биће анализирани сви објекти који покривају $N = 1, 2, \dots, 5$ чворова решетке. Анализираће се и одређен број објеката величине $N = 6$ са циљем потврђивања добијених резултата. За све објекте биће одређена временска зависност покривања решетке у бизини финалне густине. Очекује се да се време релаксације увећава са бројем различитих оријентација које објекат може заузети приликом смештања на кубну решетку.



Слика 4.2: Конфигурација за 3Д крстасти објекат на густини загушења.

Тема 4.3: Перколације на хетерогеним супстратима

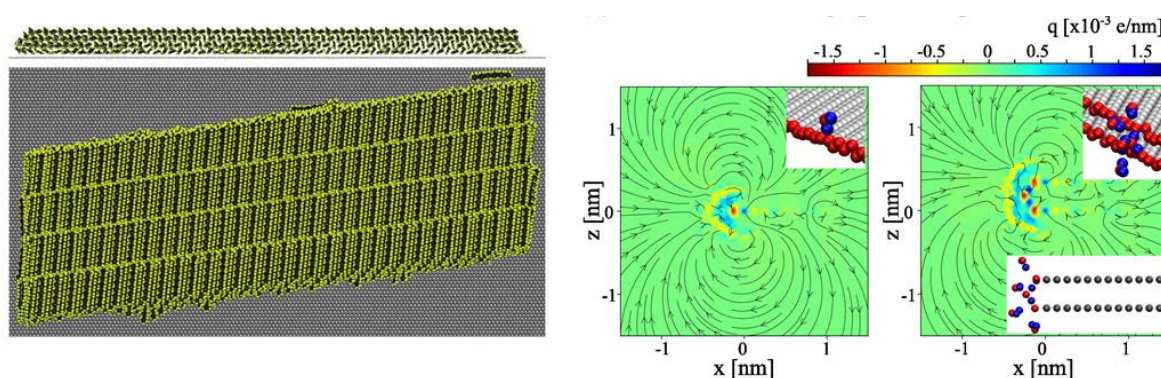
Биће изучавана перколациона својства иреверзибилне депозиције полидисперзних смеша сложених објеката на планарној триангуларној решетки. Депоновани објекти разних облика и величина се креирају као самонепресецајуће шетње на решетки. Биће разматране све класе објеката више ротационе симетрије (k -мери, троуглови, ромбови, шестоуглови). У моделу се за разне полидисперзне смеше анализира зависност границе загушења и перколационог прага од типа основног објекта који генерише смешу. Перколациона својства полидисперзних смеша биће такође проучавана у случају нехомогеног субстрата који је моделован додавањем тачкастих дефеката на решетку. У анализу ће такође бити укључена и анизотропија депозиције која је инкорпорирана у модел коришћењем различитих вероватноћа приликом смештања објеката на решетку дуж различитих праваца. Очекује се да компактност објеката који чине смешу има пресудан утицај на вредност перколационог прага.

Тема 4.4: Моделирање експеримената и примењених система са дугодометним интеракцијама

У оквиру ове истраживачке теме биће обрађивана два система са доминантно дугодометним интеракцијама: органски молекули са функционалним јединицама које носе наелектрисање и магнетне наночестице. Са интензивним развојем рачунарских перформанси последњих деценија дошло је до преплетања рачунарства високих перформанси и модерне физике. Наиме, рачунари и модели физичких система изведени

помоћу рачунарских симулација, користе се као алат за истраживање у распону од изучавања фундаменталних аспеката самоорганизације наночестица у комплексне структуре, па све до директних индустријских примена. Рачунарске симулације система са доминантно дугодометним интеракцијама представљају добар пример научне мултидисциплинарности, узевши у обзир да укључују више различитих наука: физику, хемију, и инжењерске науке.

У оквиру ове истраживачке теме интензивно и двосмерно ћемо сарађивати са експерименталним истраживачким групама. Поента експериментално-теоријске сарадње је постизање разумевања и описивања експерименталних резултата добијених помоћу напредних техника, попут апаратуре на бази површинских сила (SFA – Surface Force Apparatus), потом микроскопије на бази атомских сила (AFM – Atomic Force Microscopy), скенирајуће тунелске микроскопије (STM – Scanning Tunneling Microscopy), као и помоћу основних лабораторијских мерења транспортних, механичких, електричних и магнетних својстава материјала од интереса.



Слика 4.3: (лево) Демонстрација епитаксије органског кристалног полупроводника на графену. (десно) Пертурбативно електрично поље воде адсорбоване на ивици листа графена (200 nm x 200 nm) моделовано помоћу реактивног поља силе (ReaxFF – Reax Force Field).

Модерно друштво и индустрија, који се енормно брзо развијају, постављају захтеве за транзицијом са фосилних горива на обновљиве изворе енергије. Потреба је да се смањи емисија угљен-диоксида због његовог штетног утицаја на глобалну климу, што намеће озбиљне технолошке и научне изазове. Пратећи глобалне напоре и тенденције, наше истраживање биће усмерено на моделовање јонског транспорта и фазне стабилности воде у мембранама горивних ћелија (Fuel Cells). Мембране састављене од полиелектролита су двофазни системи у којима вода испуњава поре сачињене од ланаца полимера и представљају одличан парадигматски систем за истраживање утицаја површине и геометријског ограничења на својства воде и транспорт протона. Полиелектролитски материјали могу да се синтетишу са различитим функционалним хемијским јединицама или да им се додају јонске течности. То чини параметарски простор за дизајн огромним, што омогућава дизајн и оптимизацију структуре за различите примене. У том процесу, пажљиво осмишљене рачунарске симулације на рачунарским системима високих перформанси представљају драгоцен алат у нашим рукама, којим можемо значајно унапредити експериментални приступ заснован на методи покушаја и грешке. На тај начин помоћу рачунарских симулација можемо драстично унапредити деликатан експериментални развојни рад.

Осим дизајна и оптимизације горивних ћелија, у оквиру исте теме моделоваћемо наноелектронске направе са хибридном органски полупроводник/дводимензионални материјал (organic semiconductor/2D material) хетероспојевима. Дводимензионални материјали имају добре транспортне карактеристике у равни. Бочни хетероспојеви пружају могућности за остваривање научно-технолошких продора у области

оптоелектронике, оптичким сензорима, као и у фотонапонским применама. Смањење контактеног отпора помоћу бочних контаката уместо уобичајених контаката преко горње површине органског кристала, смањује омовске губитке и доводи до развоја направа мале снаге, укључујући тунелске транзисторе од органских кристала са ефектом поља (FET – Field Effect Transistors). Смањено расипање топлоте позитивно ће се одразити и на механичку стабилност материјала. Штавише, брзина рада наноелектронских направа попут транзистора и фотодетектора, биће значајно повећана с обзиром да паразитски контактни отпор кроз горњу површину органског кристала смањује брзину померања носилаца наелектрисања, услед смањеног интензитета унутрашњег електричног поља. Наши модели омогућавају разумевање структуре органског материјала на контакту са графеном (бирамо графен као широко примењивани материјал). Поред тога, детаљно ћемо моделовати и рачунати локална електрична поља. У оквиру овог истраживања проучаваћемо и један једноставнији физички систем - графенске тунелске транзисторе са водом адсорбованом на њиховим ивицама.

Трење је узрок значајних губитака енергије у свим гранама индустрије. Конкретно, у сектору транспорта приближно једна трећина горива потрошеног у возилима повезана је са губицима услед трења. У складу са том чињеницом, боље разумевање механизма трења и подмазивања веома је пожељно и може довести до значајне уштеде и повећања ефикасности. Поред губитака узрокованих трењем, хабање покретних делова представља механизам неодвојиво повезан са трењем. Хабање такође узрокује значајне губитке услед потребе за редовном заменом хабајућих покретних делова у возилима свих врста. Из наведених разлога се ова два фундаментална физичка процеса проучавају заједно у оквиру научне дисциплине познате као рачунарска трибологија. Наиме, трибологија је мултидисциплинарна наука која комбинује физику, хемију и инжењерске науке, а бави се проучавањем механизма трења, хабања и подмазивања. У наредном периоду биће проучавана употреба воде и јонских течности као адитива индустријски примењиваних мазива за смањење трења и хабања. Физичке особине јонских течности попут занемарљивог притиска паре и високе јонске покретљивости, као и велика разноврсност јонских течности и њихових раствора, истичу их као материјале релевантне за подмазивање. Катјони и ањони који чине јонске течности уобичајено су асиметрични и неправилног облика, укључујући дуге алкилне ланце хемијски везане за катјонску главу. Ова геометријска неправилност је важна карактеристика јонских течности зато што ефикасно спречава уређење на ниским температурама и кристализацију замењује аморфним стањем. У оквиру овог истраживања испитиваћемо и мале молекуле у којима су доминантне поларне интеракције, као што су вода и алкохоли (попут етанола и пропанола). Испитиваћемо њихове триболошке особине на различитим атомски равним кристалним површинама, попут силицијум-диоксида, графена и графита, дихалкогенида прелазних метала (TMD – Transition Metal Dichalcogenides) и хексагоналног борон-нитрида (hBN – hexagonal Boron Nitride).

Осим система у којима су присутне Кулоновске и електричне дипол-диполне интеракције, истраживаћемо и магнетне системе наночестица са различитом магнетном и геометријском анизотропијом. Наши магнетни системи се састоје од дискретних честица које интерагују преко магнетне диполарне интеракције. Конкретно, истраживаћемо равнотежу и динамичке концепте у наномагнетизму и магноници. Занимају нас две могуће реализације система: микроскопска и макроскопска. У оквиру ове подтеме истраживаћемо како се наночестице различитих магнетних материјала и облика организују у планарне, тубуларне и хеликалне архитектуре помоћу просторног конфинирања, или дизајна интеракција: ван дер Валсове и стеричне интеракције.

Потпројекат 5: Структура, динамика, и функција биолошких и социо-економских система

Руководилац: др Марија Митровић Данкулов

Учесници: др Марија Митровић Данкулов, др Саша Лазовић, др Игор Франовић, др Јелена Смиљанић, др Дарија Обрадовић, др Ива Бачић, др Александар Богојевић

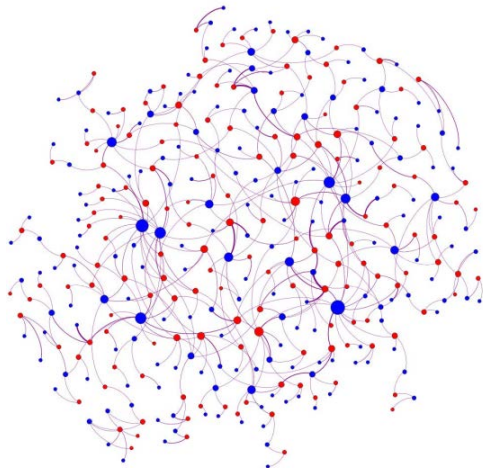
Студенти докторских студија: Ана Вранић (ментор др Марија Митровић Данкулов), Дарја Цветковић (ментор др Марија Митровић Данкулов)

Биолошки и социо-економски системи се састоје од великог броја интерагујућих елемената и испољавају нетривијално колективно понашање. Као такви спадају у групу вишечестичних интерагујућих система познатих под именом комплексни системи. Структура мреже интеракција утиче на динамику ових система, испољавање колективног појавног понашања и његова својства, као и на функцију самих система. Структура ових система се константно мења у времену, као код већине социо-економских система и дела биолошких, или је последица еволуције ових система и утицаја околине на њих. Стога, динамика и функција ових система повратно утичу на њихову структуру.

Циљ науке је да разуме ове међусобне утицаје и везе, а све са циљем боље предикције њихове динамике и функције, налажења начина за њихову контролу и вођење, разумевање њихове еволуције, као и могућношћу да се овакви системи имитирају у циљу дизајна ефикасних вештачи генерисаних система и материјала са различитим корисним функцијама. У оквиру физике, рачунарских наука, биологије, социологије, економије, хемије и фармације, између осталог, су развијене и разивјају се методе, технике и парадигме које нам омогућавају да до детаља изучимо везу између структуре, динамике и функције комплексних система. Сарадња истраживача из ових области је довела до развоја интердисциплинарних и мултидисциплинарних приступа који омогућавају свеобухватно изучавање оваквих система. Ови приступи обухватају и комбинују сва три комплементарна приступа у науци: експеримент, теорију и нумерику. Делови истраживања у оквиру овог потпројекта представљаће основу за докторски рад Ане Вранић и Дарје Цветковић.

Истраживачки рад ће се одвијати у оквиру следећих тема:

Тема 5.1: Развој метода за анализу структуре и динамике комплексних система



Слика 5.1: Пример комплексне мреже интеракција у социјалним групама.

Структура мреже интеракција система се репрезентује комплексном мрежом. Теорија комплексних мрежа нам омогућава да квантитативно опишемо структуру и динамику комплексних мрежа (слика 5.1). Циљ ове интердисциплинарне области науке, која се налази у пресеку математике, физике и рачунарских наука је развој квантитативних приступа који омогућавају да се изучава еволуција структуре комплексне мреже, механизми који воде ову еволуцију, динамички процеси на мрежама, као и веза између структуре и динамике комплексне мреже. Поред разумевања, ова област науке нам даје и алате који омогућавају класификацију комплексних мрежа, као и предвиђање будуће структуре комплексне мреже.

У оквиру ове истраживачке теме радићемо у неколико праваца.

Развој вештачке интелигенције за анализу и предикцију различитих типова података, је показао да се на повезаним подацима не могу применити стандардни алати машинског и дубоког учења. Ово је довело да развоја специјалне класе неуралних мрежа погодних за развој модела дубоког учења на умреженим подацима, познатих као граф-неуралне мреже. Показало се да су ове класе неуралних мрежа врло погодне за предвиђање будуће структуре комплексних мрежа, у смислу предвиђања линкова у њима, као и њихову класификацију. Као и све неуралне мреже, и граф-неуралне мреже, на користе сет неких предефинисаних особина самих система да класификују или предвиде понашање комплексне мреже. Један од великих изазова у области неуралних мрежа је да не постоји систематски начин одређивања ових особина. Теорија комплексних мрежа, у комбинацијама са другим техникама дубоког учења, као што су експланаторни модели машинског учења, нам могу пружити боље разумевање и лакше одређивање критеријума за одабир особина које неурална мрежа користи за учење. Један од задатака овог потпројекта ће бити детаљна анализа граф-неуралних мрежа и најрелевантнијих особина које оне користе за предикцију структуре и класификацију комплексних мрежа. Методе развијене овде ће касније бити коришћене за истраживања у темама 5.2 и 5.5.

Карактеристика реалних комплексних мрежа је да имају мезоскопску структуру, односно да се састоје од заједница и модула. Налажење ових заједница у комплексним мрежама је нетривијалан задатак. У оквиру ове теме биће настављен и рад на даљем развоју алгорита ИНФОМАП алгорита за детекцију заједница базиран на протоку информација у мрежи. Посебан фокус ће бити на регуларизацији алгорита за детекцију заједница у комплексним мрежама са интеракцијама вишег реда. Методе развијене у оквиру ове теме биће коришћене за проучавање феномена у оквиру теме 5.2.

У оквиру ове теме радићемо и на развоју метода за мапирање на комплексне мреже и анализу различитих типова података. Конкретно радиће се на методама за мапирање података у форми временских серија на различите типове мрежа и анализу еволуције њихове структуре, као и детекцију догађаја који доводе до значајних промена у структури мреже. Даље, развијаће се и методе за анализу метилације ДНК код пацијената са постковид симптомима. Методе развијене у оквиру ове теме биће коришћене за проучавање феномена у оквиру теме 5.2.

Тема 5.2: Колективна динамика у социо-економских системима

Једна од основних особина комплексних система по којој се разликују у односу на друге системе је појава емергентног колективног понашања. Ово понашање је последица постојања интеракција између конститутивних јединица самог система и не може се предвидети на основу понашања појединачних јединица. Настајање и динамика колективног понашања стога је јако зависна од структуре мреже интеракција, односно комплексне мреже. У оквиру ове истраживачке теме биће изучавани колективни феномени у социјалним системима применом метода статистичке физике, теорије комплексних мрежа, рачунарских наука, и социологије.

Колективно поверење или социјално поверење је један од основних фактора који утиче на динамику и опстанак социјалних група и заједница. Настаје у социјалним групама као последица интеракције између корисника омогућава им да међусобно деле информације и знање, пружају једни другима подршку, сарађују и размењују добра. У малим социјалним групама поверење између два појединца настаје или нестаје као последица репетитивних међусобних интеракција. У великим групама у којима појединац познаје тек део других чланова заједнице појединци морају да се ослањају на искуства других

када је у питању поверење које упућују члановима заједнице. Настанак колективног поверења у великим заједницама је директно повезано са структуром мреже интеракција и емотивним садржајем који се дели кроз те интеракције. Циљ истраживања у оквиру ове теме је да се разумеју механизми утицаја структуре на динамику колективног поверења у различитим типовима социјалних група, као и да се детектују структурални фактори који воде ка настанку и порасту колективног поверења, односно његовом нестанку. Колективно поверења има две компоненте, колико заједница верује појединцу и колико појединац верује заједници. У оквиру овог истраживања биће адаптирани постојећи и развијени нови модели мерења колективног поверења у социјалним заједницама. Коришћењем метода теорије комплексних мрежа, статистичке физике и рачунарских наука биће анализирана динамика колективног поверења у различитим реалним заједницама, еволуцију структуре интеракција у њима, као везу између структуре комплексне мреже и динамике колективног поверења. Да би се испитали сви потенцијални сценарији, биће развије модел емотивних агената који међусобно интерагују и кроз интеракцију развијају или уништавају поверење. Коришћење овог модела омогућиће симулацију социјалних група и динамику колективног поверења у њима у различитим сценаријима и под различитим условима.

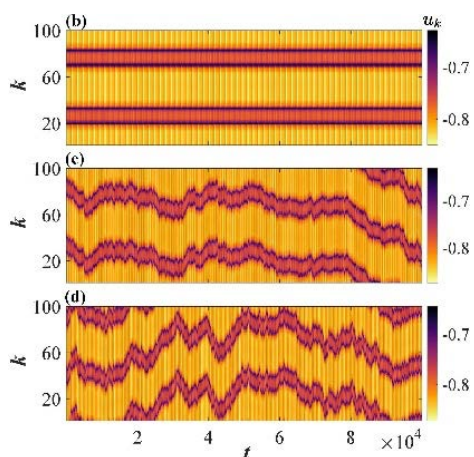
Колективна пажња у социјалним заједницама која настаје као последица интерних догађаја унутар заједнице или спољашњих догађаја ван заједнице је тема која заокупља пажњу великог броја истраживача. У оквиру ове теме биће истражен феномен колективне пажње екстерних догађаја кроз анализу активности појединца у различитим онлајн заједницама. Фокус ће бити на квантитативном опису динамике колективне пажње, разумевање ефеката које екстерни догађаји имају на настанак колективне пажње, као и на преливање колективне пажње са тема које су уско повезане са екстерним догађајима на мање повезане теме. У те сврхе користићемо методе статистичке физике, анализе временских серија, социологије и рачунарских наука, као и методе развијене у теми 5.1.

Тема 5.3: Патерни парцијалне синхронизације у системима ексцитабилних елемената са нелокалним интеракцијама

Од открића химера, патерна које одликује коегзистенција домена просторно локализованог екстензивног хаоса и регуларне динамике, фокус истраживања у системима спрегнутих осцилатора померио се са проблема одређивања услова за настанак синхронизоване динамике на проблеме настанка и карактеризације патерна парцијалне синхронизације на путу од потпуне синхронизације до десинхронизованог стања. Патерни парцијалне синхронизације у просторно дистрибуираним системима, укључујући химере и солитарна стања, подразумевају спонтано нарушење симетрије, у смислу да у системима идентичних јединица са симетричним интеракцијама неке јединице манифестују другачије средње фреквенције осциловања, тј. постају некохерентне (frequency unlocked) у односу на већину кохерентних (frequency locked) јединица. Показало се да је један од одлучујућих фактора за појаву стања парцијалне синхронизације у системима спрегнутих осцилатора нелокалност интеракција, а да је настанак таквих стања могуће проучавати комбиновањем теорија бифуркација и детерминистичког хаоса у просторно дискретним системима, односно у оквиру От-Антонсеновог формализма у лимесу континуума. Међутим, интуиција која је развијена у системима спрегнутих осцилатора не може да се пренесе у системе ексцитабилних јединица, које манифестују осцилације само под утицајем спољашње стимулације, између осталог и зато што колективни феномени у њима типично подразумевају значајан утицај одбојних, а не само привлачних интеракција. Ексцитабилност представља основну динамичку парадигму бројних система, од нервног и мишићног ткива до хемијских реакција, ласера и модела климе, и постоји потреба да се због

објашњења њихове функционалности и потенцијалне контроле објасне генерички механизми настанка стања парцијалне синхронизације у спрегнутим ексциtabilним системима. У оквиру ове теме, истраживаћемо патерне парцијалне синхронизације у системима спрегнутих ексциtabilних јединица у циљу утврђивања степена аналогije са системима спрегнутих осцилатора; проналажењу нових типова самоорганизације својствених само за ексциtabilне системе; испитивању мултистабилности и начина контроле switching динамике између различитих стања. Предвиђено је да се поред примене досад познатих теоријских метода развију и нове методе које ће омогућити детаљну анализу стања у лимесу континуума.

Тема 5.4: Емергентна динамика у адаптивним мрежама



Слика 5.2: Примери периодичних и хаотичних patched патерна парцијалне синхронизације.

У великом броју примера, од неуронских и сензорних до других биолошких, хемијских и социјалних система, интеракције између елемената нису статичне него се мењају у складу с динамиком јединица, стварајући повратну спрегу у којој локална динамика утиче на промену јачине или других карактеристика интеракција, а измењене интеракције последично доводе до промене динамике јединица. Такви системи представљени су моделима адаптивних мрежа, при чему се адаптација интеракција типично одвија на много споријој временској скали од локалне динамике јединица. У истраживању емергентне динамике адаптивних мрежа спрегнутих осцилатора, највећи напредак досад је остварен на пољу истраживања прелаза ка синхронизованом

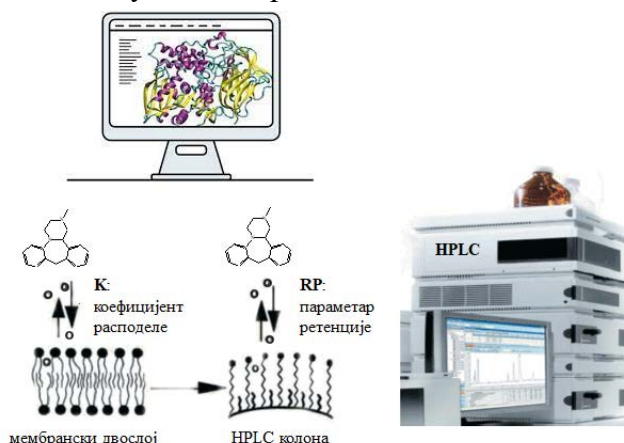
стању у оквиру формализма master stability функције, као и у класификацији различитих типова фреквентних кластер стања. Међутим, значајно мањи напредак остварен је на плану детаљног испитивања утицаја динамике на вишеструким временским скалама на саморганизацију динамике адаптивних мрежа. Такође, није познато ни на који начин се утицај шума у локалној динамици манифестује на колективном нивоу и какви су резултати интеракције између адаптације и шума. На крају, није познато ни како се емергентна динамика адаптивних мрежа мења у случају да елементи система нису интринзични осцилатори већ ексциtabilне јединице, као што је типично у неуронским мрежама, или уколико постоји диверзитет, тако да систем садржи и интринзичне осцилаторе и ексциtabilне јединице. У оквиру ове теме, биће испитане могућности интеграције метода анализе динамике на вишеструким временским скалама и стохастичког усредњавања у истраживање самоорганизације адаптивних мрежа; утврђен утицај ексциtabilне локалне динамике и диверзитета локалне динамике на колективно понашање; испитани услови за настанак појединих стања парцијалне синхронизације, као и утврђивање њихових области стабилности и мултистабилности.

Тема 5.5: Примена течне хроматографије, вештачке интелигенције и гасне плазме у биомиметици, биотехнологији и комплексним системима

У оквиру ове теме, Лабораторија за биомиметику бавиће се применама течне хроматографије, вештачке интелигенције и гасне плазме у биомиметици, биотехнологији и комплексним системима. Такође, бавиће се конструкцијом биомиметичких модела за предвиђање понашања лекова у биолошким системима, истраживањима везаним за теоријске аспекте вештачке интелигенције, као и за примену

различитих алгоритама вештачке интелигенције у оквиру сложених система. Радићемо и на применама гасне плазме у третманима материјала и биолошких узорака.

Течна хроматографија. Савремени дизајн нових лекова укључује моделирање фармакокинетичког понашања и карактеризацију физичко-хемијских особина молекула-кандидата. Ово је веома важно у раној фази развоја нових лекова, јер обезбеђује структурну оптимизацију и избор одговарајућег лека-кандидата, чиме се смањују трошкови и ризици даљег тестирања на животињама и људима. Биомиметички системи се користе за симулацију физиолошког окружења лек-рецептор интеракције и процену непознатих и сложених механизма који предводе понашање молекула у живим организмима. Како би се поуздано дефинисала природа претпостављених механизма, испитују се присутни физички феномени и примењују рачунарске симулације заједно експерименталним методама. Биомиметички-лабораторијски модели, подржани разумевањем присутних физичких процеса и применом савремених рачунарских технологија, омогућавају предвиђање основног биофармацеутског и фармакокинетичког профила и на тај начин усмеравају даљи процес дизајна нових лекова (слика 5.3). Хроматографске технике се успешно користе у профилисању молекула-кандидата, јер захтевају мале количине не нужно чистих једињења. Циљ нашег истраживања је симулација биолошког окружења кроз дефинисање присутних физичких феномена и обједињавање хроматографских и рачунарских технологија како би се разумео физиолошки образац понашања лекова. Потребно је издвојити најзначајније информације које повезују механизме ретенције у хроматографији и механизма понашања лекова у живим организмима.



Слика 5.3: Примена биомиметичких модела у предвиђању понашања лекова у биолошким системима (пролазак лека кроз ћелијске мембране).

Вештачка интелигенција. Главни истраживачки фокус биће везан за истраживање теоријских концепата вештачке интелигенције, као и практичних реализација и примена различитих алгоритама вештачке интелигенције у оквиру разних сложених система, укључујући и виртуелне светове. Бавићемо се аутономним и интелигентним понашањем агената, као и применама технологије виртуелних светова у образовању (наука, технологија, инжењерство), кроз концепте *serious gaming*-а, виртуелних лабораторија, и сличних метода. Примењиваћемо методе вештачке интелигенције и машинског учења у решавању различитих проблема и у другим областима.

Гасна плазма. У оквиру овог правца бавићемо се проучавањем и дијагностиком неравнотежних плазми и применама на третман материјала. Проучаваћемо и развој извора неравнотежних плазми на атмосферском притиску, уз биотехнолошке и биомедицинске примене. Радићемо на реализацији и проучавању нових материјала, пречишћавању вода, применама плазме и других напредних оксидативних процеса у заштити животне средине.