

Fizinių ir technologijos mokslų centras (FTMC)

KOMPLEKSNĖS FIZIKINĖS SISTEMOS IR JŲ TYRIMO METODŲ PLĖTRA (2022-2026)

TIKSLAS

Kurti ir tobulinti teorinius bei eksperimentinius metodus fundamentalioms problemoms biofizikoje, kietojo kūno fizikoje, optikoje ir astrofizikoje spręsti.

SVARBIAUSIEJI UŽDAVINIAI

1. Netiesinės dinamikos ir valdymo teorijos metodų taikymas sudėtingų neuroninių tinklų sistemų tyrimui.
2. Elektroninės struktūros teorijos metodų kūrimas ir taikymas optoelektroninių reiškinių tyrimui puslaidininkiuose.
3. Fliktuacinių metodų kūrimas ir taikymas naujų puslaidininkinių darinių tyrimui.
4. Vektorinių optinių laukų inžinerija: generavimas ir elgesio fotoninėse sistemose tyrimas.
5. Stochastinių megasistemų evoliucijos tyrimas dirbtinio intelekto metodais.

METODOLOGINIS TYRIMŲ PAGRINDIMAS

Kiekvienas programos uždavinys turi savo metodologinę specifiką, tačiau juos jungia planuojami naudoti ar sukurti bendri tyrimo metodai programos uždaviniams spręsti.

1. **Uždavinys:** *Netiesinės dinamikos ir valdymo teorijos metodų taikymas sudėtingų neuroninių tinklų sistemų tyrimui.* Žmogaus smegenų neuroninis tinklas yra labai sudėtingas tyrimo objektas, nes jį sudaro milžiniškas sąveikaujančių neuronų skaičius, ir tokioms sistemoms tiesiogiai modeliuoti kol kas nepakanka kompiuterinių išteklių. Tačiau skaičiavimo apimtis galima iš esmės sumažinti pritaikius modelių redukcijos metodus, naudojamus netiesinės dinamikos moksle. Pasitelkus šiuos metodus galima išvesti paprastus makroskopinius tinklo modelius, apimančius nedidelį skaičių paprastųjų diferencialinių lygčių, tiksliai aprašančių suvidurkintą neuroninio tinklo dinamiką termodinaminėje riboje [I. Ratas & K. Pyragas, *Phys. Rev. E*, **100**, 052211 (2019)]. Redukuoti modeliai yra ne tik efektyvūs mažinant skaičiavimo apimtis, bet ir įgalina geriau suprasti sinchronizaciją, makroskopinius virpesius ir kitus kolektyvinius neuroninių tinklų reiškinius bei kurti efektyvius šių reiškinių valdymo algoritmus [K. Pyragas et al., *Phys. Rev. E*, **102**, 012221 (2020)]. Šių modelių kūrimui ir tobulinimui bus skiriamas didžiausias dėmesys.

2. **Uždavinys:** *Elektroninės struktūros teorijos metodų kūrimas ir taikymas optoelektroninių reiškinių tyrimui puslaidininkiuose.* Šis uždavinys bus sprendžiamas modeliuojant kvant-mechanines medžiagų savybes remiantis tankio funkcionalo teorija [C. E. Dreyer, A. Alkauskas et al., *Annu. Rev. Mater. Res.*, **48**, 1 (2018)]. Kuriama metodologija bus taikoma tiriant naujos kartos optoelektronikos prietaisus, tokius kaip pavienių fotonų šaltiniai, šviesa valdomi kvantiniai bitai ir kvantiniai sensoriai, o taip pat puslaidininkiniai šviestukai. Bus skaičiuojama: optinių linijų virpesinė struktūra, sukinių kietuosiuose kūnuose relaksacijos laikai, magnetinio rezonanso atsakas, nespindulinė rekombinacija taškiniuose defektuose. Dalį tyrimų sudarys kvantinių kompiuterių pritaikymas spręsti medžiagotyros klausimus. Bus ieškomos uždavinių klasės, kur kvantiniai kompiuteriai (ar kvantiniai akceleratoriai) gali turėti didžiausią perspektyvą.

3. **Uždavinys:** *Fliktuacinių metodų kūrimas ir taikymas naujų puslaidininkinių darinių tyrimui.*

Tyrimų tikslas yra sukurti karštųjų elektronų fliktuacinius metodus naujų puslaidininkinių darinių (plačiatarpių puslaidininkinių, metalų oksidų, grafeno ir kt.) eksperimentiniams ir teoriniams tyrimams

esant stipriems elektriniams sužadiniams plačiuose elektronų dujų tankių ir elektrinių laukų stiprių intervaluose. Eksperimentinius tyrimus atliksime mikrobangų ruože matuodami silpnas elektrines fliktuacijas stipraus impulsinio elektrinio lauko fone, kuomet galima gauti informaciją apie kinetinius vyksmus karštosiose elektronų dujose [E. Šermukšnis et al., *J. Appl. Phys.*, **117**, 065704 (2015)]. Kinetinių vyksmų ir fliktuacijų modeliavimas bus atliekamas skaitmeniniais metodais sprendžiant Bolcmano kinetinę lygtį [M. Ramonas et al., *J. Appl. Phys.*, **128**, 055702 (2020)]. Tyrimų rezultatai bus panaudoti naujų tranzistorių ir THz emiterių kūrimui bei tobulinimui.

4. Uždavinys: *Vektorinių optinių laukų inžinerija: generavimas ir elgesio fotoninėse sistemose tyrimas.* Viena iš svarbiausių užduočių šiuolaikiniuose fotonikos taikymuose yra sukurti vektorinius elektromagnetinių (EM) bangų lygčių sprendinius su lanksčiai valdoma optinio židinio forma tiek sklidimo ašyje (ašinis dizainas), tiek skerspjūvyje (pluošto formavimas). Specifiniai fotoniniai elementai kuriami individualiai projektuojant subbanginio dydžio meta-atomus (įvairių medžiagų ir formų sub-struktūras), kurie sudaro metapaviršių ir sukuria pageidaujamą struktūrinę šviesą [S. Orlov et al., *J. Quant. Spectr. Rad. Trans.*, **261**, 107490 (2021)]. Tokių metapaviršiais pagrįstų fotoninių elementų taikymai yra nuo metalėšių iki specialiosios optikos plačiame EM bangų ruože – nuo ultravioletinių iki terahercinių bangų [L. Minkevičius et al., *Opt. exp.*, **27**, 36358 (2019)]. Pagrindinės numatomos spręsti problemos: a) vektorinių EM laukų su pageidaujamomis savybėmis inžinerija židinio aplinkoje ir jų charakterizavimas; b) meta-atomų ir metapaviršių projektavimas siekiant generuoti pageidaujamus EM laukus; c) vektorinių EM laukų pritaikymas lazeriniam mikroapdirbimui, dalelių manipuliavimui ir objektų vaizdinimui.

5. Uždavinys: *Stochastinių megasistemų evoliucijos tyrimas dirbtinio intelekto metodais.* Naudojant magnetohidrodinaminius modelius [V. Springel et al., *Month. Not. RAS*, <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2020arXiv201003567S/abstract> (2020)] bus sprendžiama aktuali aktyvių galaktikų branduolių ir galaktikų koevoliucijos problema. Remiantis aktyvių branduolių kuriamų tėkmių evoliucijos modeliu [K. Zubovas, *Month. Not. RAS*, **473**, 3525 (2018)] bus kuriama mašininio mokymo algoritmais paremta metodika realių galaktikų aktyvumo istorijoms nustatyti. Bus nagrinėjamas tėkmių poveikis galaktikos morfologijai, žvaigždėdarai ir cheminei evoliucijai. Remiantis konvoliucinių neuroninių tinklų metodu [J. Bialopetravičius et al., *Astron. Astrophys.* **621**, A103 (2019)] bus kuriami adaptyvūs algoritmai žvaigždžių sistemų aptikimui dangaus apžvalgose. Stochastinių žvaigždžių sistemų modeliavimas N-kūnų metodais įgalins nustatyti parametrų evoliucinių kitimų ribas ir padidinti metodo jautrį keliomis eilėmis išplečiant tyrimui prieinamą erdvės tūrį [R. Stonkutė et al., *Astron. Astrophys.* **627**, A7 (2019)].

VYKDYMUI REIKALINGOS LĖŠOS

Programos vykdymui reikalingi 24 norminiai etatai.

PROGRAMOS VADOVAS Prof. dr. Vladas Vansevicius