

*Форма открытия (продления) Проекта /
Подпроекта КИП*

УТВЕРЖДАЮ

Директор Института

_____/_____
“ ____ “ _____ 202_ г.

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ОТКРЫТИЯ / ПРОДЛЕНИЯ
ПРОЕКТА / ПОДПРОЕКТА КРУПНОГО ИНФРАСТРУКТУРНОГО ПРОЕКТА
ПО НАПРАВЛЕНИЮ ИССЛЕДОВАНИЙ
В ПРОБЛЕМНО-ТЕМАТИЧЕСКОМ ПЛАНЕ ОИЯИ**

**1. Общие сведения о проекте / подпроекте крупного инфраструктурного проекта
(далее КИП)**

1.1. Шифр темы / КИП (для продлеваемых проектов) – *шифр темы включает дату открытия, дата окончания не указывается, т. к. она определяется сроками завершения проектов в теме.*

1.2. Шифр проекта / подпроекта КИП (для продлеваемых проектов и подпроектов)

1.3. Лаборатория

ЛТФ

1.4. Научное направление

Теоретическая физика

1.5. Наименование проекта / подпроекта КИП

Сложные материалы

1.6. Руководитель(и) проекта / подпроекта КИП

Е. М. Аницаш

1.7. Заместитель(и) руководителя проекта / подпроекта КИП (научный руководитель проекта/ подпроекта КИП)

2. Научное обоснование и организационная структура

2.1. Аннотация

Огромный недавний прогресс как в искусстве подготовки образцов, так и в методах измерения расширил наши возможности для получения высококачественных и больших наборов данных о структурных и физических свойствах новых сложных материалов. Доступность таких данных вместе с развитием аналитических и численных методов открывает двери для значительного улучшения нашего понимания таких материалов и того, как их структура и свойства соотносятся в разных масштабах. Действительно, такой синергетический подход стоит за недавними прорывами в различных приложениях, таких как квантовые вычисления, термоядерная энергия, биологические или композитные материалы.

2.2. Научное обоснование (цель, актуальность и научная новизна, методы и подходы, методики, ожидаемые результаты, риски)

Главной целью этого проекта станут теоретические исследования физических явлений и процессов в конденсированных средах, изучение свойств новых перспективных материалов, построение и анализ теоретических моделей и разработка аналитических и расчетных методов их решения.

Соответствующие сложные материалы, которые должны быть исследованы, - это атомарно тонкие полупроводники, составы с колоссальным магнитосопротивлением, системы с тяжелыми фермионами, низкоразмерные квантовые магниты с сильным спин-орбитальным взаимодействием или топологические изоляторы. Они привлекают сейчас значительное внимание, как с точки зрения фундаментальных исследований, так и в качестве перспективных материалов для приложений, например, квантовых вычислений. Аналогичным образом будут анализироваться умные композитные материалы, фрактальные и слоистые структуры, биологические макромолекулы.

Планируемые исследования для этих типов материалов следующие:

- Установление полуаналитической связи между энергией и размерами экситонов в атомарно тонких полупроводниках и средней диэлектрической проницаемостью по отношению к их ближайшему диэлектрическому окружению.
- Вывод дальнедействующего диполь-дипольного взаимодействия между экситонами в их возбужденных состояниях.
- Теоретические и экспериментальные исследования строения сложных иерархических систем, в том числе фракталов и биологических макромолекул.
- Теоретические исследования электронных свойств наночастиц для исследований в области электроники.
- Теоретические и экспериментальные исследования плотной случайной упаковки со степенным распределением по размерам в нано- и микромасштабах.
- Применение и разработка квантовых алгоритмов для вычислительных задач физики конденсированного состояния и квантовой химии.

- Развитие теории устойчивости смесей квантовых жидкостей.
- Численное и экспериментальное исследование радиационной стойкости различных соединений.
- Численное и теоретическое исследование ядерных квадрупольных взаимодействий в рутиловых и редкоземельных оксидах.
- Исследование спиновых волн с помощью тензорных сетей и методов ренормализационной группы матрицы плотности.

В качестве основных методов планируется использовать следующие:

- Стандартные методы квантовой механики и квантовой химии.
- Численные и аналитические методы.
- Малоугловое рассеяние (нейтронов, рентгеновских лучей).
- Рассеяние нейтронов и облучение.
- Ab initio расчеты.
- Молекулярно-динамическое моделирование и т. д.;

2.3. Предполагаемый срок выполнения

2028

2.4. Участвующие лаборатории ОИЯИ

- Лаборатория нейтронной физики имени Франка (А. С. Дорошкевич, А. И. Куклин).
- Лаборатория информационных технологий Мещерякова (З.А. Шарипов, З. К. Тухлиев, Е. П. Юкалова, П. В. Зрелов, О. В. Иванцова, Л. А. Сюракшина).
- Лаборатория ядерных реакций имени Флерова (Мирзаев М.Н.).
- Лаборатория ядерных проблем Джелепова (Е. П. Попов)

2.4.1. Потребности в ресурсах МИВК

Вычислительные ресурсы	Распределение по годам				
	1 год	2 год	3 год	4 год	5 год
Хранение данных (ТБ) - EOS - Ленты	1	1	1	1	1
Tier 1 (ядро-час)	1	1	1	1	1
Tier 2 (ядро-час)	1	1	1	1	1
СК «Говорун» (ядро-час) - CPU - GPU	1	1	1	1	1

Облака (CPU ядер)					
-------------------	--	--	--	--	--

2.5. Участвующие страны, научные и научно-образовательные организации

Организация	Страна	Город	Участники	Тип соглашения
Институт физики твердого тела	Болгария	София	Х. Шамати	Совместная работа
Университет Сан-Паулу	Бразилия	Сан-Карлос	В. С. Банято	Совместная работа
Западный университет Тимишоары	Румыния	Тимишоара	И. Бика	Совместная работа

2.6. Организации-соисполнители *(те сотрудничающие организации/партнеры без финансового, инфраструктурного участия которых выполнение программы исследований невозможно. Пример — участие ОИЯИ в экспериментах LHC в CERN)*

3. Кадровое обеспечение

3.1. Кадровые потребности в течение первого года реализации

№№ п/п	Категория работника	Основной персонал, сумма FTE	Ассоциированный персонал, сумма FTE
1.	научные работники	12	0
2.	инженеры	0	0
3.	специалисты	0	0
4.	служащие	0	0
5.	рабочие	0	0
	Итого:	12	0

3.2. Доступные кадровые ресурсы

3.2.1. Основной персонал ОИЯИ

№№ п/п	Категория работников	ФИО	Подраздел ение	Должность	Сумма FTE
1.	научные работники	Е. М. Аницаш	Дирекция ЛТФ	Заместитель директора ЛТФ	1
		А. Л. Куземский	Сектор 1, ЛТФ	Ведущий Научный Сотрудник	1
		Х. Н. Кам	Сектор 1, ЛТФ	Ведущий Научный Сотрудник	1
		В. И. Юкалов	Сектор 1, ЛТФ	Ведущий Научный Сотрудник	1
		В.Ю. Юшанхай	Сектор 1, ЛТФ	Ведущий Научный Сотрудник	1
		А. А. Донков	Сектор 1, ЛТФ	Старший Научный Сотрудник	1
		П. А. Максимов	Сектор 1, ЛТФ	Старший Научный Сотрудник	1
		А. Ю. Черный	Сектор 1, ЛТФ	Старший Научный Сотрудник	1
		А. А. Владимиров	Сектор 1, ЛТФ	Старший Научный Сотрудник	1

		Н. Д. Тунг	Сектор 1, ЛТФ	Младший Научный Сотрудник	1
		Н. Н. Боголюбов	Сектор 1, ЛТФ	Главный Научный Сотрудник	0.1
2.	инженеры				
3.	специалисты				
4.	рабочие				
	Итого:	11			

3.2.2. Ассоциированный персонал ОИЯИ

№№ п/п	Категория работников	Организация-партнер	Сумма FTE
1.	научные работники	0	0
2.	инженеры	0	0
3.	специалисты	0	0
4.	рабочие	0	0
	Итого:	0	0

4. Финансовое обеспечение

Финансирование проекта будет осуществляться через тему «Теория сложных систем и перспективных материалов»

Руководитель проекта / подпроекта КИП _____ / _____ /

Дата представления проекта / подпроекта КИП в ДНОД _____

Дата решения НТС Лаборатории 13.04.2023, номер документа 14

Год начала проекта / подпроекта КИП 2024

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЙ ПРОЕКТА / ПОДПРОЕКТА КИП

НАИМЕНОВАНИЕ ПРОЕКТА / ПОДПРОЕКТА КИП

УСЛОВНОЕ ОБОЗНАЧЕНИЕ ПРОЕКТА / ПОДПРОЕКТА КИП

ШИФР ПРОЕКТА / ПОДПРОЕКТА КИП

ШИФР ТЕМЫ / КИП

ФИО РУКОВОДИТЕЛЯ ПРОЕКТА / ПОДПРОЕКТА КИП

СОГЛАСОВАНО

ВИЦЕ-ДИРЕКТОР ИНСТИТУТА

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА

ГЛАВНЫЙ УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
ИНСТИТУТА

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА

ГЛАВНЫЙ ИНЖЕНЕР

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА

ДИРЕКТОР ЛАБОРАТОРИИ

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА

ГЛАВНЫЙ ИНЖЕНЕР ЛАБОРАТОРИИ

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ ЛАБОРАТОРИИ

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА

РУКОВОДИТЕЛЬ ТЕМЫ / КИП

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА

РУКОВОДИТЕЛЬ ПРОЕКТА /
ПОДПРОЕКТА КИП

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА

ОДОБРЕН ПКК ПО НАПРАВЛЕНИЮ

ПОДПИСЬ

ФИО

ДАТА