

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U001174

Державний реєстраційний номер: 0122U001575

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Теорія багаточастинкових станів і магнітних властивостей мезоскопічних систем.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380577051247

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 960.000
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Магнітні властивості мезоскопічних систем із внутрішніми ступенями вільності

Назва роботи англійською:

Magnetic properties of mesoscopic systems with internal degrees of freedom

Реферат українською:

Метою дослідження було побудувати сучасні чисельні алгоритми, що спроможні з достатньою точністю описувати багаточастинкові стани та магнітні властивості мезоскопічних систем, а також надавати можливість передбачати низку нових фізичних ефектів. Розроблено метод варіаційної оптимізації нескінченних проєктованих станів заплутаної пари на стільниковій ґратці. Метод заснований на автоматичному диференціюванні групи перенормування кутової матриці переходу. Підхід застосовано до антиферромагнітної моделі Гейзенберга зі спіном $-1/2$ і ферромагнітної моделі Китаєва на стільниковій ґратці. Розроблений формалізм дає кількісно точні результати для основних фізичних спостережуваних і має необхідний потенціал для подальших розширень. Це дослідження має на меті встановити, чи можуть інші ефективні методи скорочення на інших ґратках призвести до стабільного варіаційного оновлення з градієнтами, отриманими за допомогою автоматичного диференціювання. Це дослідження зосереджено на узагальненні підходу групи перенормування кутової матриці переносу до тензорної мережі стільникової ґратки. Це дослідження відкриває кілька напрямків майбутніх досліджень. Алгоритм може бути природним чином застосований до фрустрованих антиферромагнетиків Гейзенберга з дальніми взаємодіями. За певних технічних модифікацій він також може бути використаний для трикутної геометрії ґратки. Крім того, було б цікаво узагальнити метод для більших елементарних комірок. Іншим можливим напрямком досліджень є застосування варіаційного методу нескінченних проєкційних заплутаних парних станів до гіперболічної геометрії ґрат, що нещодавно було реалізовано в експериментах. Нарешті, автоматичне диференціювання може бути ефективно застосоване до методу тензорної групи перенормування та його модифікацій. Це відкриває шлях для варіаційної оптимізації методу нескінченних проєкційних заплутаних парних станів з перенормуванням тензорів.

Реферат англійською:

The goal of the research is to build modern numerical algorithms that favorably describe the multiparticle states and magnetic properties of mesoscopic systems with sufficient accuracy, as well as provide an opportunity to transmit a number of new physical effects. A method of variational optimization of infinite projected states of an entangled pair on a cellular lattice has been developed. The method is based on the automatic differentiation of groups of renormalization of the angular transition matrix. The approach is applied to Heisenberg antiferromagnetic model with spin $-1/2$ and Kitaev ferromagnetic model on a honeycomb lattice. The developed formalism gives several accurate results for the main physical observables and has the necessary potential for further extension. This study aims to establish that other effective reduction methods on other grids can lead to a stable variational update with gradients obtained by automatic differentiation. This research focuses on the generalization of the angular matrix renormalization group approach transferred to the cellular lattice tensor network. This study opens several directions for future research. The algorithm can be naturally applied to frustrated Heisenberg antiferromagnets with long-range interactions. With certain technical modifications, it can also be used for a triangular geometric lattice. In addition, it would be interesting to generalize the method to larger unit cells. Application of the variational method of infinite projection entangled pair states to hyperbolic lattice geometry, something that has long been implemented in experiments, is another possible direction of research. Finally, automatic differentiation can be effectively applied to the tensor group method of renormalization and its modifications. This paves the way for variational optimization of the method of infinite

projection entangled pair states with tensor renormalization.

Індекс УДК: 53 , 537.9

Коди тематичних рубрик: 29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Раткевич Сергій Станіславович

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання: С.Н.С.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Теорія магнітних систем, які складаються зі скінченного числа взаємодіючих атомів у вироджених багаточастинкових квантових станах ідеальних газів, підпорядкованих статистиці Бозе-Ейнштейна або Фермі-Дірака, захоплених у гармонічних потенціалах оптичних пасток для нейтральних атомів.

Назва НТП англійською: The theory of magnetic systems consisting of a finite number of interacting atoms in degenerate multiparticle quantum states of ideal gases subject to Bose-Einstein or Fermi-Dirac statistics trapped in harmonic potentials of optical traps for neutral atoms.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: Квантова механіка

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Реалізовано варіаційну оптимізацію iPEPS у межах автоматичної диференціації групи перенормування кутової матриці переходу для стільникової ґратки. Метод перевірено на відповідних антиферромагнітних моделях Гейзенберга та ферромагнітній Китаєва та отримано результати, порівняні з результатами сучасного квантового моделювання Монте-Карло та підходу точної діагоналізації.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут», Інститут магнетизму НАН України та МОН України, Інститут фізики конденсованих систем (ІФКС) НАН України, Інститут теоретичної фізик

Перспективні ринки: США, Німеччина, Франція, Україна, країни Євросоюзу.

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

1. Slyusarenko Yu. V., Ryzha I. A., Kirdin A. I., Nonlinear dynamics of kinetic fluctuations and quasi-linear relaxation in plasma // Mathematical Modeling and Computing, 2023, Volume 10(2), p. 421–434.
<https://doi.org/10.23939/mmc2023.02.421>
2. Bilokon V., Bilokon E., Bañuls M. C., Cichy A., Sotnikov A., Many-body correlations in one-dimensional optical lattices with alkaline-earth(-like) atoms // Scientific Reports, 2023, Volume 13(1), p. 9857.
<https://doi.org/10.1038/s41598-023-37077-1>
3. Lukin I. V., Sotnikov A. G., Variational optimization of tensor-network states with the honeycomb-lattice corner transfer matrix // Physical Review B, 2023, Volume 107(5), p. 054424.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.054424>
4. Rudychev V. G., Azarenkov M. O., Girka I. O., Lazurik V. T., Rudychev Y. V., Optimization of converter and bremsstrahlung characteristics for object irradiation // Radiation Physics and Chemistry, 2023, Volume 206, p. 110815. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2023.110815>
5. Rudychev V. G., Azarenkov N. A., Girka I. O., Rudychev Y. V., Optimization of radiation shields made of Fe and Pb for the spent nuclear fuel transport casks // Nuclear Engineering and Technology, 2023, Volume 55(2), p. 690–695. <https://doi.org/10.1016/j.net.2022.10.002>
6. Lazurik V., Sawan S., Lazurik V., Rudychev V., Control of process parameters of two-sided irradiation of electron beam in radiation technologies // Proceeding - 2023 IEEE 3rd International Maghreb Meeting of the Conference on Sciences and Techniques of Automatic Control and Computer Engineering, MI-STA 2023, 2023, p. 25–29.
<https://doi.org/10.1109/MI-STA57575.2023.10169519>
7. Контейнер для транспортування та/або зберігання відпрацьованого ядерного палива : пат. 153110 Україна : МПК G21F 5/008 (2006.01), G21F 5/02 (2006.01) / В.Г. Рудичев, М.О. Азаренков, І.О. Гірка, С.В. Литовченко, Є.В. Рудичев ; заявник і володілець Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна. – № u 2022 02462 заявл. 11.07.2022 ; опубл. 24.05.2023, Бюл. № 21. – 6 с.

Х. Заключение відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Булахов Микита Сергійович
(01.04.02)

Лазурик Валентина Михайлівна

Лукін Ілля Володимирович
(01.04.02)

Наумовець Артем Сергійович
(к. ф.-м. н.)

Пелетминський Олександр Сергійович
(к. ф.-м. н.)

Петренко Олексій Дмитрович.

Рудичев Єгор Володимирович
(к. ф.-м. н.)

Сотніков Андрій Геннадійович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Гречко О.В.

Телефон

+38 (099) 185-29-33

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

