

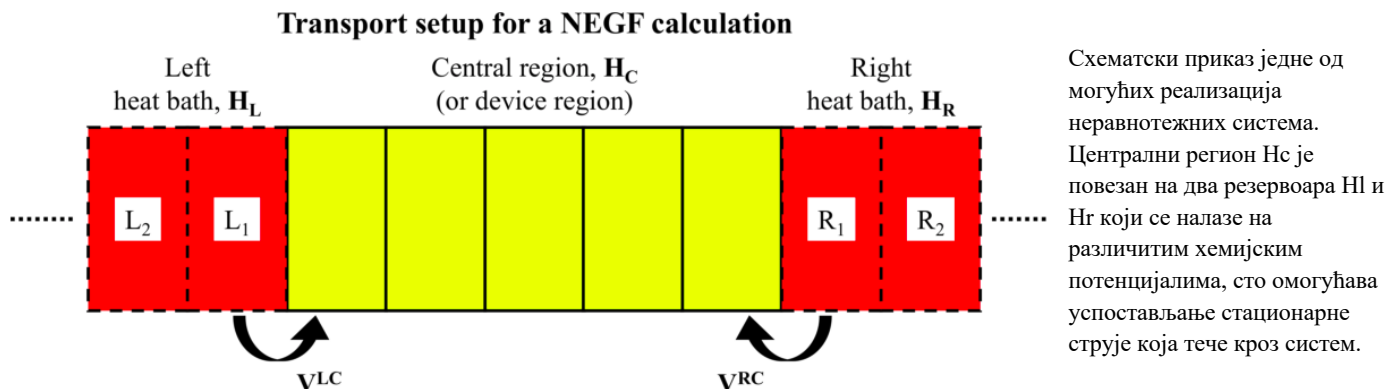
## Списак тема за мастер радове у Центру за изучавање комплексних система Института за физику у Београду

Тема: Електронски транспорт у неравнотежним (јако корелисаним) системима

Предлагач: др Милош Радоњић (Е-mail: [milos.radonjic@ipb.ac.rs](mailto:milos.radonjic@ipb.ac.rs), Web: <http://www.scl.rs/milos>)

Тренутно једна од врло активних области у оквиру Теоријске физике кондензоване материје која је у развоју. У оквиру овог истраживања може се дефинисати више тема за мастер радове. Они би у принципу били базирани на испитивању равнотежних и неравнотежних електронских и транспортних особина кристалне решетке састављене од спин-поларисаног система са једном орбиталом (и два спина) на нивоу *Tight-binding* модела (неинтерагујући електрони), или Хабардовог модела (интерагујући електрони), у зависности од интересовања кандидата. У току рада кандидат ће овладати формализмом неравнотежних Гринових функција, упознати се са методама за опис неравнотежних система и ближе се упознати са поменутиим моделима и начинима за њихово решавање.

Пошто део рада може обухватати и развој нумеричких кодова (додавање одређених функционалности постојећем коду), кандидати који поседују солидно знање С или С++ програмског језика, могу бити укључени и у тај део.

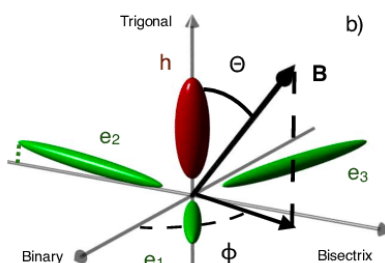
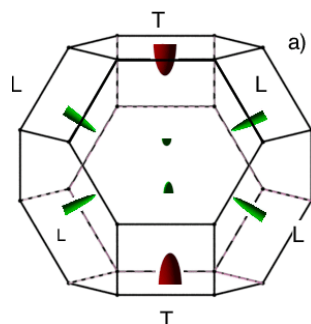
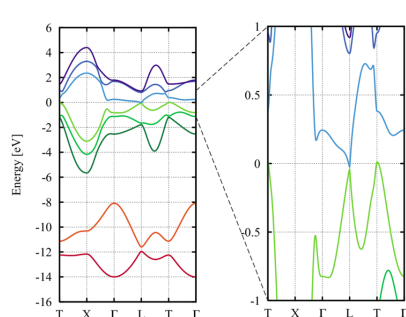


Ова тема се може наставити и у тему за докторске студије. Један од праваца је развој пакета за израчунавање неравнотежних својстава реалних материјала и његова примена. Истраживање се одвија у сарадњи са групом из Немачке, тако да постоји могућност краћих, или дужих академских посета.

## Тема: Испитивање порекла суперпроводности у елементалном бизмуту

Предлагач: др Милош Радоњић (E-mail: [milos.radonjic@ipb.ac.rs](mailto:milos.radonjic@ipb.ac.rs), Web: <http://www.scl.rs/milos>)

Наведена тема пружа прилику кандидату за упознавање са методама и (*DFT*) пакетима за израчунавање електронских и фононских особина реалних материјала. У конкретном примеру испитиваћемо порекло суперпроводности у бизмуту на амбијенталном притиску, утицај електрон-фонон интеракције на електронске особине и критичну температуру суперпроводности. С друге стране испитаћемо индиције да суперпроводност потиче од ефективних електронских корелација између одређених орбитала. Ово се постиже израчунавањем суперпроводних корелационих функција на *Tight-binding* моделу са додатим жељеним електронским корелацијама.



Електронска структура и Фермијева површ бизмута на амбијенталном притиску.

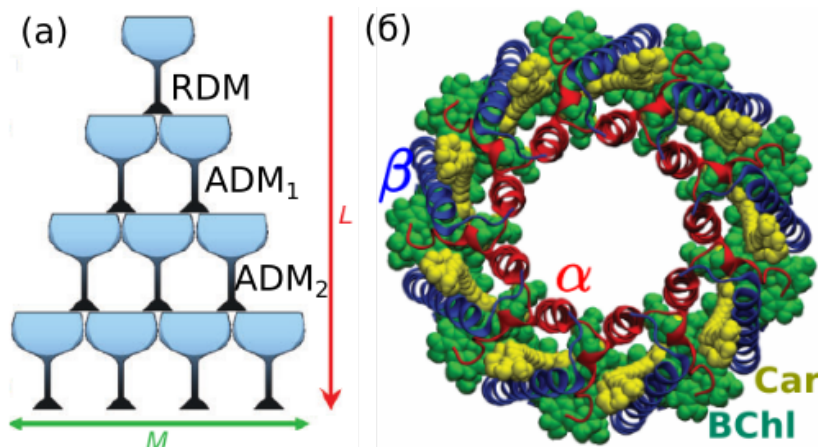
У оквиру ове методологије постоји више тема које се могу наставити на докторским студијама. Неке од њих су истраживања својстава реалних јакокорелираних материјала са, или без неуређености. Прорачуни јакокорелираних материјала обухватају самоусаглашено решавање Хабардовога модела користећи реалне параметре добијене помоћу *DFT*-ја, познатије као *DFT+DMFT* метод. Ова истраживања се одвијају у блиској сарадњи са групама из Немачке, тако да постоји могућност краћих, или дужих академских посета.

## Тема: Нумерички егзактни третман равнотежних својстава једнодимензионалног Холштајновог модела

Предлагач: др Вељко Јанковић (Е-mail: [veljko.jankovic@ipb.ac.rs](mailto:veljko.jankovic@ipb.ac.rs), Web: <http://www.scl.rs/veljko>)

Проблем квантномеханичког описа равнотежних својстава и динамике електронских ексцитација (електрона, шупљина, екситона) које интерагују са нуклеарним вибрацијама (фононима) формирајући тзв. полароне је свеprisутан у физици кондензоване материје. Електрон–фонон интеракција фундаментално одређује транспортна својства, нпр. проводност материјала или ефикасност трансфера ексцитационе енергије у фотосинтетичким пигмент–протеин комплексима.

Истраживање би се фокусирао на једнодимензионални Холштајнов модел који представља најједноставнији нетривијални модел са електрон–фонон интеракцијом. Током више од шест деценија, Холштајнов модел је проучаван различитим пертурбационим и варијационим техникама, док је примена тзв. **нумерички егзактних приступа** почели тек недавно. У овом истраживању бисмо примењивали **формализам матрице густине и хијерархијске једначине кретања (ХЕОМ)**, видети слику 1(а). Заинтересовани кандидат би се укључио у активну линију истраживања која тежи да искористи транслаторну симетрију проблема у циљу смањења нумеричке захтевности ХЕОМ (како у погледу меморије, тако и у погледу процесорског времена). Кандидат би учествовао у аналитичком формулисању и нумеричком решавању нове форме ХЕОМ за **одређивање равнотежног стања система међусобно спрегнутих електронских ексцитација и фонона**. Развијени формализам би се искористио за детаљно **описивање структуре равнотежног поларонског стања** за различите вредности моделних параметара. Као занимљив пример примене развијене технике, могли бисмо размотрити **квантификовање степена делокализације** екситона у високо-симетричним фотосинтетичким пигмент–протеин комплексима, видети слику 1(б).



Слика 1. (а) Схематски приказ структуре ХЕОМ. Чаша на врху представља редуковану матрицу густине (RDM), док две, три и четири чаше испод ње представљају помоћне матрице густине (ADM) на дубинама 1,2 и 3, редом. (б) Поглед одозго на LH2 (Light Harvesting complex 2) комплекс бактерије *Rhodospseudomonas acidiphilia*. Молекули бактерио-хлорофила (Bchl, зелено) и каротеноида (Car, жуто) су смештени у полимерну матрицу састављену од алфа и бета апопротеина и образују симетричну прстенасту структуру.

Заинтересовани кандидати треба да су положили испите **Квантна статистичка физика, Теорија кондензованог стања и Квантна теорија поља 1**. Предложена тема је нарочито погодна за кандидате који имају **склоност ка аналитичком раду** и познају **основе програмирања** (C, C++, python).

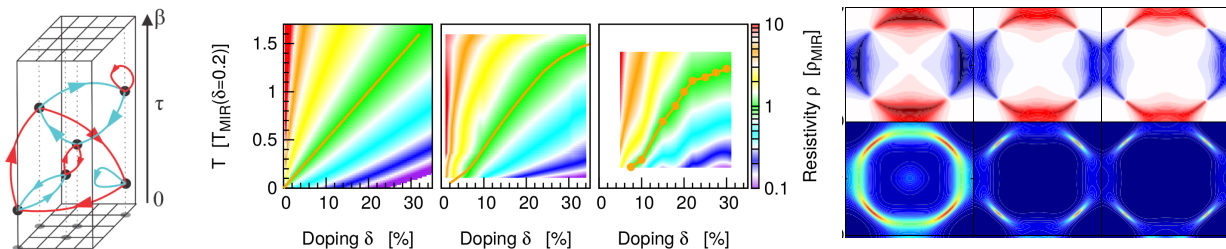
Током израде мастер рада, студент би се кроз практичан рад упознао са основним поставкама формализма матрице густине, теорије отворених квантних система и нумерички егзактних приступа.

## Тема: Високотемпературна суперпроводност у Хабардовом моделу

Предлагач: др Јакша Вучичевић (Е-mail: [jaksa@ipb.ac.rs](mailto:jaksa@ipb.ac.rs), Web: <http://www.scl.rs/jaksa>)

Суперпроводност је стање система у ком електрична струја тече без дисипације енергије, и спољње магнетно поље бива поништено у унутрашњости система. Овакво понашање је последица ступања електрона у колективно квантно стање, и испољава се само на јако ниским температурама. Дуго након открића суперпроводности 1911. године, сматрало се да је практична примена ове појаве јако ограничена потребом да се систем хлади на температуре реда 10 Келвина. Ово схватање је промењено нагло крајем двадесетог века, када су откривени материјали суперпроводни на температурама и до 150 Келвина. Уз одговарајуће хлађење, ови материјали већ налазе примену као најјачи електромагнети у машинама за магнетну резонанцу, акцелераторима честица, токамак машинама и другде. Међутим, потенцијално револуционарна примена у енергетици, електроници и транспорту ће бити могућа тек када суперпроводност буде опстајала на собној температури.

Теоријски опис и пуно разумевање механизма високотемпературне суперпроводности је један од најважнијих задатака у физици кондензованог стања материје. Међутим, високотемпературна суперпроводност је ефекат јаких међуелектронских корелација, и могуће ју је описати само у оквиру праве вишечестичне квантне теорије. Нажалост, проблем више квантних честица, поготову кад су у питању фермиони, је најтежи у свој физици. До егзактних или бар контролисаних решења је могуће доћи само у најједноставнијим моделима, што умањује предиктивну моћ теорије за појединачна једињења. Развој теоријских метода које омогућавају решење сложенијих модела и приступ физичким режимима од интереса мора претходити даљем помаку у области. Такође, суперпроводност је у конкуренцији са још неколико различитих јако-корелираних фаза као што су антиферромагнет, фаза лажног енергетског процепа и поготову „чудни метал“. Пуно разумевање ових фаза је такође од примарног интереса, јер може садржати важне увиде и за суперпроводност.



У оквиру предложеног истраживања има неколико могућих тема за мастер рад. У нашој групи, рад се првенствено дели на развој и примену нумеричких метода. У оквиру развоја метода, фокус је на квантним Монте Карло симулацијама, оптимизацији постојећих и имплементацији нових алгоритама који омогућавају контролисано решење проблема више квантних честица. Што се тиче примене метода, решаваћемо првенствено Хабардов модел који успешно описује генерички фазни дијаграм високотемпературних суперпроводника као што су купратна и капа-органска једињења. Егзактно решење Хабардовог модела је углавном отворено питање, као и питање карактера различитих фаза, тј. вредности опсервабли и доминантних физичких механизма. Најважније, није познато које су вредности параметара модела оптималне за суперпроводност, нити које је уопштење модела најпогодније за суперпроводност. Овакво сазнање би било од интереса за дизајн нових суперпроводника. Рад се одвија у сарадњи са групама из Париза, Љубљане и Ерлангена (Немачка).



**Тема: Few-body quantum chaos in many-body systems**

**Предлагач: др Михаило Чубровић** (E-mail: [cubrovic@ipb.ac.rs](mailto:cubrovic@ipb.ac.rs), Web: <http://www.scl.rs/mihailo>)

Quantum chaos is the manifestation of nonintegrability (or nonlinearity, roughly speaking) in systems which have no trajectories (because of the wave nature of the Schrodinger equation). Therefore, quantum chaos is seen not in equations of motion but either in energy level statistics or in correlation function decay. The former are usually studied in few-body systems (molecules, nuclei) and the latter in many-body systems (Ising and Heisenberg models, Sachdev-Ye-Kitaev model, etc.).

Modern cold atom and quantum optics experiments allow the measurement of energy levels in many-body systems, a fascinating feat that allows a glimpse into detailed dynamics of systems with hundreds or thousands of constituents. We will consider a simple model representative of such measurements and try to predict the decay of out-of-time ordered correlation functions (OTOC) from energy level statistics. In this way we will connect the two notions of quantum chaos and relate the available experimental results to fancy theoretical concepts recently developed for the studies of OTOC (chaos bounds, firewall problem, etc.).

Requirements: solid university-level knowledge in Quantum Mechanics and Quantum Statistical Physics. We will do some (relatively simple) numerical simulations in Mathematica or MATLAB. Master course in Quantum Many-Body Theory recommended (not obligatory).



**Тема: Black hole chaos diagnostics from gravitational waves**

**Предлагач: др Михаило Чубровић** (E-mail: [cubrovic@ipb.ac.rs](mailto:cubrovic@ipb.ac.rs), Web: <http://www.scl.rs/mihailo>)

There is a deep and important paradigm in classical chaos theory known as KAM theorem -- roughly speaking, small perturbations only introduce very slow and limited chaos (that's why our Solar system is de facto stable for billions of years despite being chaotic). The very notion of chaos becomes subtle in general relativity where there is often no globally defined time direction. But the geometric properties of orbits still give some idea of how "regular" or "chaotic" the motion is. Now that we have gravitational wave observations as a new hot tool, dynamics and collisions in accretion disks of black holes may be probed directly and the description and detection of chaos in general relativity becomes more than just a curiosity.

The task is to find an informal analogue of KAM theorem for motion in general relativity -- geometric structures in phase space which remain stable upon small perturbations. The model we consider is a deformation of a Schwarzschild or Kerr black hole (but we may discuss some other model if the student prefers). When we have defined what regular and chaotic orbits are, we will compute their gravitational wave signature and discuss the chances to observe such a beast.

Requirements: solid university knowledge in Theoretical Mechanics and Mathematics (analysis mostly), some Statistical Physics would be nice but not essential. We will do numerical simulations in Mathematica but nothing complicated. Master course in General Relativity recommended (not obligatory).





## **Тема: Corrugated black holes for strange metallic transport**

**Предлагач: др Михаило Чубровић** (E-mail: [cubrovic@ipb.ac.rs](mailto:cubrovic@ipb.ac.rs), Web: <http://www.scl.rs/mihailo>)

This project deals with the mysterious state of electrons in strongly correlated materials such as high-temperature superconductors. The ground state in such materials is known as the strange metal and exhibits a number of unique properties: universal scaling of resistivity with temperature, long-range quantum entanglement and absence of anything resembling quasiparticles. Recently, cold-atom simulations of the strange metal have found surprisingly simple behavior of charge transport. We want to reproduce these findings quantitatively and predict what happens in the transitional regime when the strange metal approaches the conventional metal phase.

To this end we will put to work an approach developed in string theory known as holography (gauge/gravity duality). Correlation functions of the material are computed using the mathematical formalism of general relativity, and the crystalline lattice of the material is formally mapped to a black hole with a lattice-like (corrugated) pattern of the event horizon. So far I have developed the general setup (action) of such a system and a code which computes the response of such black holes and turns them into correlation functions of the strange metal. The task for the student is to perturb such a system by a density wave and see if there is a phase transition -- this will give the picture of the strange metal in the vicinity of the critical line.

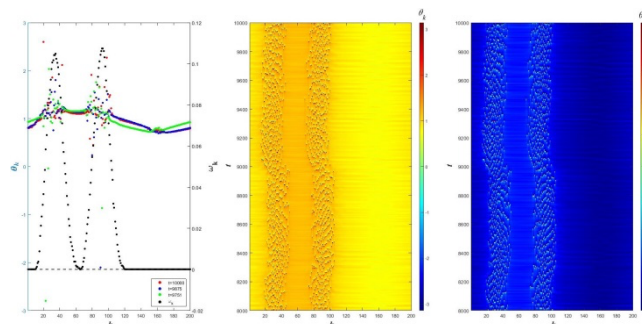
Requirements: zero prior knowledge of strings and gauge/gravity duality -- I'll explain these (to the extent we need them for the project) as we go. Solid university-level knowledge in Condensed Matter and Quantum Electrodynamics is required. Master courses in General Relativity and Quantum Many Body Theory recommended (not obligatory). We will do programing in C or Mathematica - there is already a working code but the student will write some new functions.

## Тема: Symmetry-broken states in arrays of non-locally coupled oscillators

Предлагач: др Игор Франовић (E-mail: [franovic@ipb.ac.rs](mailto:franovic@ipb.ac.rs), Web: [www.scl.rs/franovic](http://www.scl.rs/franovic))

The classical Kuramoto paradigm based on synchronization of weakly coupled phase oscillators has provided an extremely successful framework for the description of the emergence of collective behavior in a large variety of systems, ranging from the onset of normal and pathological rhythms in the brain or the mechanisms regulating heartbeat, up to gene expression, certain types of social behavior, mode-locked lasers and power grids. Such universality comes from the fact that all these systems exhibit synchronization-mediated self-organization, where the macroscopic dynamics undergoes a continuous phase transition from a disordered state of phase turbulence to a state of partial synchrony, whereby increasing the coupling strength counteracts the effect of heterogeneity of oscillators' natural frequencies. All these phenomena essentially refer to global synchronization, i.e. the onset of the collective mode. Nevertheless, it has recently come to light that introducing *non-local interactions* in spatially extended systems of identical oscillators gives rise to a completely new realm of **partially synchronized states**, involving *spontaneous symmetry (or rather synchrony) breaking*.

In particular, one observes hybrid coherence-incoherence patterns, characterized by the coexistence of coherent/synchronized and incoherent/asynchronous spatial domains. These states have fittingly been named **chimeras**, after a mythical beast that is, just as its dynamical counterparts, comprised of incongruous parts. Their existence was hidden for a long time because in many instances, they coexist with the uniformly synchronous state. The generic mechanisms leading to the onset and collapse of chimeras have so far remained elusive. Moreover, chimeras have been considered as outliers in the realm of patterns, typically existing in bubbles bounded by two-fold bifurcations, appearing and disappearing completely unrelated to the classical mechanisms of pattern formation in coupled dynamical systems. Another intriguing type of synchrony-breaking is provided by the so-called **solitary states**, the term coming from the Latin word *solitarius*, meaning alone or isolated. Indeed, a typical solitary state involves one or more isolated units oscillating with different mean frequency compared to the frequency-synchronized bulk. Solitary states are different from the chimeras because the desynchronized units do not connect into a localized group. This Master thesis will be focused on gaining insight into the mechanisms for the onset and collapse of chimeras and solitary states, considering both the continuum limit in terms of bifurcation analysis within the Ott-Antonsen framework, and the finite-size systems, using classical chaos theory in finite-dimensional systems.







## Тема: Macroscopic resonant phenomena in heterogeneous coupled systems

Предлагач: др Игор Франовић (E-mail: [franovic@ipb.ac.rs](mailto:franovic@ipb.ac.rs), Web: [www.scl.rs/franovic](http://www.scl.rs/franovic))

Noise in excitable or multi-stable systems may in general induce two different types of effects: on the one hand, the noise may enhance or suppress certain features of deterministic dynamics by acting on the system states in an inhomogeneous fashion, while on the other hand, it may fundamentally change the deterministic dynamics by giving rise to qualitatively novel forms of behavior associated with crossing of thresholds and separatrices, or stabilization of deterministically unstable structures. The most prominent example of the latter type are the *resonant phenomena*, which is the umbrella term for different forms of the system's nonlinear response to noise. In most of the instances, noise plays the constructive, i.e. facilitatory role, contributing to optimization of the system's behavior, as evidenced in many real-world applications, from neural networks and chemical reactions to lasers and electronic circuits. The classical examples of stochastic facilitation include stochastic resonance, where noise of appropriate intensity may induce oscillations in bistable systems that are preferentially locked to a weak periodic forcing; coherence resonance, where an intermediate level of noise may trigger coherent oscillations in excitable systems, or inverse stochastic resonance, where the noise may reduce the intrinsic spiking frequency of neuronal oscillators, transforming the tonic firing into a bursting-like activity or even quenching the oscillations.

In all of these instances, resonant effects have been observed only at the level of single excitable or bistable elements, i.e. they have been considered as a microscopic phenomenon. Nevertheless, what happens in coupled systems? Is it possible that the collective response of the system may be enhanced by noise? For instance, it is clear that the collective rhythms in the brain exist in a highly noisy environment: could such coherent collective oscillations be triggered by macroscopic resonant effects, based on synchronization between local noise-induced oscillations? The initial studies confirm that it is indeed so, and that the interaction between the diversity of local dynamics, manifested as heterogeneity of local bifurcation parameters, and noise and/or external weak forcing may give rise to collective coherence resonance or diversity-induced resonance, opening up a completely new realm of macroscopic resonant phenomena. The focus of this master thesis will be on explaining the generic mechanisms and the conditions required for **collective coherence resonance**. The goal will be to explain how the process of synchronization of noise-induced oscillations in a population of heterogeneous excitable and oscillatory units gives rise to this novel type of collective resonant phenomenon.



**Тема: Проучавање покретљивости електрона у полупроводничким материјалима**

**Предлагач: др Ненад Вукмировић** (E-mail: [nenad.vukmirovic@ipb.ac.rs](mailto:nenad.vukmirovic@ipb.ac.rs), Web: [www.scl.rs/nenad](http://www.scl.rs/nenad))

И поред тога што је покретљивост електрона најважнија физичка величина за опис електричних особина материјала још увек не постоје поуздани методи да се на основу кристалне структуре материјала предвиди покретљивост електрона. Покретљивост електрона је одређена њиховом интеракцијом са фононима, па је главни корак у њеном одређивању рачунање константи електрон-фонон интеракције. У претходних неколико година је у нашој групи развијен рачунарски програм који полазећи од константи електрон-фонон интеракције рачунате на ретком гриду електронских и фононских таласних вектора одређује те константе на густом гриду, а на основу тога и покретљивост носилаца. Мастер рад би могао да обухвата примену ове методологије на разумевање покретљивости у конкретним полупроводничким материјалима или даљи рад на развоју методологије.