НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ
79011 м. Львів, вул. Свєнціцького 1
тел. (032)276-1978, факс (032)276-1158, icmp@icmp.lviv.ua

ПОГОДЖУЮ
Директор Інституту фізики конденсованих систем
НАН України

Тарас БРИК
(Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)

М.П.

ПРОМІЖНИЙ ЗВІТ
(анотований звіт)
про виконану роботу в рамках реалізації проєкту
з виконання наукових досліджень і розробок
Міждисциплінарний центр комп'ютерного моделювання: створення, фундаментальні дослідження, навчання та сталий розвиток

Науковий керівник проєкту _____ Тарас БРИК
(підпис)

Рік завершення 2024, номер етапу 1

Підготовку звіту завершено «11» грудня 2024 р.

1. **Назва конкурсу** Дослідницькі інфраструктури для проведення передових наукових досліджень

2. **Номер державної реєстрації проєкту** 0124U004952

3. **Номер Договору про надання грантової підтримки** № 249/0019

4. **Підстава для реалізації проєкту з виконання наукового дослідження і розробки**
Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України протокол від «27» червня 2024 року № 20

5. **Найменування організації/установи грантоотримувача** Інститут фізики конденсованих систем НАН України

6. **Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ наукового керівника проєкту** Тарас БРИК

7. **Місце основної роботи та посада наукового керівника проєкту** Інститут фізики конденсованих систем НАН України

8. **Терміни та тривалість виконання проєкту:**
Тривалість проєкту 28.5 місяців
Початок *01.08.2024*
Закінчення *31.12.2026*
Тривалість звітного етапу 4.5 місяців
Початок *01.08.2024*
Закінчення *13.12.2024*

9. **Обсяги фінансування проєкту:**
Загальний обсяг фінансування:
за заявкою на отримання грантової підтримки *24 684,409* **тис. грн.**
за рішенням наукової ради НФДУ *24 684,409* **тис. грн.**
Обсяг фінансування звітного етапу:
за заявкою на отримання грантової підтримки *4 896,529* **тис. грн.**
за договором на отримання грантової підтримки *4 886,647* **тис. грн.**
фактичний *4 683,129* **тис. грн.**

10. **Перелік виконавців з оплатою праці**

№ з/п	Прізвище, ім'я, науковий ступінь, вчене звання	Основне місце роботи або навчання	Наявність статусу молодого вченого (на момент подачі звіту)	Посада за проєктом	Форма залучення виконавця (договір ЦПХ, строковий трудовий договір)	Основні завдання у проєкті (стисло окреслити функції)	Особистий підпис

1	Брик Тарас, д.ф.-м.н., проф.	ІФКС НАН України	ні	керівник проєкту, директор	договір ЦПХ	керівництво проєктом, виконання першопринципного моделювання, написання наукових статей	
2.	Пацаган Тарас, д.ф.-м.н., ст. досл.	ІФКС НАН України	ні	виконавець, заст. Директора	договір ЦПХ	Комп'ютерне моделювання МД і МФГ хелатних комплексів, написання статтей	
3.	Ільницький Ярослав, д.ф.-м.н., професор	ІФКС НАН України	ні	виконавець, зав. Відділу	договір ЦПХ	Моделювання крупнозернистою молекулярною динамікою адсорбції LDL частинок	
4.	Щур Ярослав, д.ф.-м.н., с.н.с.	ІФКС НАН України	ні	виконавець, пров. наук. сп.	договір ЦПХ	першопринципне моделювання, аналіз експериментальних даних	
5.	Баумкетнер Андрій, д.ф.-м.н., с.н.с.	ІФКС НАН України	ні	виконавець, пров. наук. сп.	договір ЦПХ	Моделювання процесу агрегації білків	
6.	Дручок Максим, к.ф.-м.н., ст. досл.	ІФКС НАН України	ні	виконавець, ст. н. сп.	договір ЦПХ	Розробка підходів машинного навчання	
7.	Пацаган Микола	ІФКС НАН України	ні	виконавець, пров. інженер	договір ЦПХ	Підготовка приміщень, закупівля обладнання кластера	

8.	Фаренюк Олег	ІФКС НАН України	ні	виконавець, пров. інженер	договір ЦПХ	Підготовка, встановлення та налагодження програмного забезпечення кластера	
9.	Кукаркін Назар	ІФКС НАН України	так	виконавець, студент	договір ЦПХ	Підготовка обладнання та налагодження програмного забезпечення для комп'ютерного класу	

11. Стислий зміст проєкту

Загальносвітовою тенденцію розвитку науки є стрімке зростання ваги комп'ютерного моделювання саме в біофізичних та фізико-хімічних галузях. Метою проекту є створення та розвиток Міждисциплінарного центру комп'ютерного моделювання (МЦКМ), спрямованого на фундаментальні дослідження у фізиці, хімії, біофізиці та наноматеріалознавстві з використанням сучасних методів атомістичного та мезоскопічного моделювання. Місія МЦКМ - об'єднати наукову спільноту в цих галузях і навчати студентів різних факультетів українських університетів, де немає курсів з комп'ютерного моделювання, або їх недостатньо. Заплановані дослідження методами комп'ютерного моделювання включають: (i) мікроскопічний опис вилучення іонів важких металів шляхом адсорбції на магнітних частинках під час очищення забрудненої води; (ii) розробка розумних поверхонь для наночастинок для забезпечення контрольованої адсорбції ліпопротеїнів з метою зменшення вмісту ліпопротеїнів низької щільності в плазмі крові; (iii) з'ясування механізму агрегації білків у нерозчинні фібрили, що має вирішальне значення при нейродегенеративних захворюваннях; та ще ряд фундаментальних задач. Створення МЦКМ дозволить заповнити ці прогалини, проводячи постійно діючі семінари(офлайн/онлайн), лекції та тренінги по методах комп'ютерного моделювання, безпосередньо навчаючи студентів та аспірантів практичному використанню паралелізованих обчислень на високопродуктивному кластері.

12. Основні результати виконання попереднього етапу *(за наявності)*

немає

13. Номер та назва звітного етапу

Етап 1. Створення МЦКМ для проведення фундаментальних наукових досліджень методами комп'ютерного моделювання

14. Опис процесу реалізації проєкту

Згідно Технічного завдання перший етап виконання проєкту складався з: формальних кроків по створенню МЦКМ; закупівлі обладнання для обчислювального кластеру та комп'ютерного класу; проведення семінарів; та виконання фундаментальних наукових досліджень. Формально МЦКМ було створено як інфраструктурний підрозділ ІФКС НАН України через рішення Вченої ради ІФКС НАН України 26 листопада 2024 року. На тому ж засіданні було ухвалено Положення (статут) МЦКМ.

При закупівлі комп'ютерних серверів та обладнання для комп'ютерного класу автори проєкту мусили пройти через ряд схвалень закупівлі Держспецзв"язком України та Національної програми інформатизації, та провести два тендери на закупівлю.

З метою заснування постійно діючих семінарів при МЦКМ 8 листопада 2024 року автори проєкту провели в ІФКС міжнародний воркшоп під назвою "Nanophysics meets computer simulations". Воркшоп транслювався через Zoom з робочою англійською мовою і був доступний для всіх зацікавлених в Україні та за кордоном. Серед учасників воркшопу були присутні фізично та виголосили доповіді троє вчених зі Швейцарії (ETH, Zurich) та один з Франції (ENS, Paris), інші доповіді науковців з Франції, Швейцарії та США були виголошені віддалено.

Фундаментальні дослідження проводились з використанням сучасних методів комп'ютерного моделювання. Розв'язано одну з давніх проблем в динаміці м'якої речовини - появу "швидкого звуку" в іонних та полярних молекулярних рідинах на нано-масштабах, який поширюється приблизно в 2-3 рази швидше за макроскопічну адіабатичну швидкість звуку. Проведено першопринципне моделювання розплаву NaCl з використанням великої системи 2400 частинок та явним врахуванням електроннної підсистеми з метою отримання поведінки колективної динаміки в довгохвильовій області.

Досліджено з перших принципів пористий кремній Si із різними діаметрами пор (~7, 11 та 14 А) та різною кількістю атомів n в елементарній комірці (n= 27, 39, 51, 55 та 75 атомів). На основі ab initio моделювання (DFT-D3, GGA) отримано стійку кристалічну структуру (максимальні сили, що діють на атом $f_{max} < 0{,}0016$ еВ/А), розраховано розподіл електронної густини, електронні спектри та густини електронних станів вздовж симетричних напрямків зони Бриллюена для всіх п'яти структурних типів пористого кремнію Si. Встановлено залежність ширини забороненої зони від структурної морфології пористого Si.

Досліджено мезоскопічні моделі полімерних щіток з азобензено-вмісних полімерів лінійної та зіркоподібної архітектур, організованих у виді просторового паттерну типу квадратної суперграткі. Виконане комп'ютерне моделювання процесу адсорбції ліпопротеїнів низької щільності (ЛНЩ) на таких щітках, що моделює терапію типу гемоперфузії, та встановлені оптимальні параметри просторового паттерну щітки.

Комп'ютерне моделювання комплексів іонів важких металів Hg,Cd,Pb,Cr утворених разом з халатуючими агентами EDTA та PEI проводилося за допомогою методу молекулярної динаміки (МД) та методу функціоналу густини (МФГ). Отримано структурні характеристики спостережуваних комплексів та розраховано енергію адсорбції. Показано, що МД непогано узгоджується з ДФТ, хоча деякі характеристики вказують на необхідність удосконалення силових полів. Особливістю виконаної роботи є те, що розглянуто EDTA при різних ступенях протонації, що дозволило передбачити стійкість отриманих комплексів в залежності від кислотності (pH) середовища.

15. Результати виконання звітного етапу відповідно до Технічного завдання до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки / Календарного плану виконання наукового дослідження і розробки:

15.1. Заплановані завдання звітного етапу проєкту

1) Ab initio моделювання динаміки іонних розплавів з 600 та більше частинок та повним врахуванням поляризаційних ефектів електронної підсистеми. Розрахунок часових кореляційних функцій та їх аналіз з метою отримання інформації про внески різного типу мікроскопічних процесів в поширення звуку.

2) Опрацювання моделі наноструктурованого пористого періодичного кристалу Si (або SiO2) із різним діаметром пор та ab initio дослідження умов стійкості кристалічної ґратки такого середовища, розрахунок його електронного спектру та густини станів.

3) Комп'ютерне моделювання процесів хелатування іонів важких металів Hg, Cd, Pb, Cr методами класичної молекулярної динаміки та методами квантової хімії. Дослідження комплексів цих іонів із такими хелатами, як EDTA та PEI.

4) Розробка мезоскопічних моделей однорідних та просторово-паттернованих азобензиновмісних полімерних щіток, сформованих шляхом приєднання гребенеподібних, зіркоподібних та дендритних полімерних фрагментів до субстрату, розробка мезоскопічних моделей LDL частинок на основі відомих експериментальних даних стосовно їх структури.
5) Отримання міжчастинкових потенціалів для чотирьох пептидів KXXF в рамках моделі RAPID для комп'ютерного моделювання агрегації фібрил. Кожен пептид містить N=4 амінокислотних залишки, що утворюють N(N-1)/2=6 внутрішньомолекулярних потенціалів. Вони будуть доповнені 6 різними міжмолекулярними потенціалами (враховуючи, що тільки 3 залишки різні), що дає в цілому 12 функцій.
6) Відбір білків для задачі автономної генерації інгібіторів. Пошук і відбір даних для цільових характеристик (набори даних для констант інгібування білків, розчинності у воді і органічних розчинниках). Підготовка даних для тренування моделей машинного навчання.
7) Розробка навчального курсу по комп'ютерному моделюванню для студентів.
8) Розробка статуту МЦКМ та затвердження його на Вченій Раді ІФКС. Створення МЦКМ.
9) Заснування та проведення постійно діючих семінарів МЦКМ.
10) Проведення робочих зустрічей з різними науковими колективами, з метою пошуку спільних інтересів та налагодження співпраці. Переговори з представниками ВНЗ.
11) Перший етап придбання обладнання для обчислювального кластера та налагодження роботи його апаратної частини. Встановлення та налагодження програмного забезпечення.
12) Підготовка приміщення та придбання обладнання для комп'ютерної лабораторії.

15.2. Отримані результати звітного етапу проєкту *(опишіть отримані результати виконавцями протягом звітного етапу, посилаючись на заплановані та досягнуті цілі, задачі та індикатори виконання, задані в Технічному завданні до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки / Календарному плані виконання наукового дослідження і розробки. Включіть посилання на публікації у наукових виданнях, інші показники з п. 18, що є підтвердженням досягнення індикаторів виконання етапу, до 70 рядків)*

Згідно поставлених задач (див. 15.1) на Етапі 1 у 2024 р. було отримано наступне:
1) Проведено першопринципне моделювання розплаву NaCl з використанням великої системи 2400 частинок з метою отримання поведінки колективної динаміки в довгохвильовій області. Для аналізу симуляцій використовувався метод узагальнених колективних мод та новий метод отримання макроскопічного значення адіабатичної швидкості звуку в іонному розплаві. Додатково, для аналізу ролі далекодії та співвідношення мас компонент проведено моделювання для ряду бінарних іонних та металічних розплавів. Проведене порівняння для різних бінарних рідин та поведінка високочастотної швидкості звуку дозволило встановити, що в іонних розплавах в'язкопружне зростання швидкості звуку є відповідальним за появу "швидкого звуку", тоді як для типового металічного розплаву Li4Tl з наявним "швидким звуком" він визначається легкою компонентою розплаву. Ці результати опубліковано в журналі Q1 J.Chem.Phys. v.161 (19) 194503 (2024). Роль співвідношення мас компонент впливає і на поперечну динаміку бінарних розплавів і, зокрема, на пропагаторну щілину для поперечних збуджень. Симуляційні та аналітичні результати опубліковано в журналі Q1 J.Chem.Phys. v.161 (18) 184505 (2024).
2) Розроблено теоретичну модель періодичного пористого кристалу кремнію Si із різними діаметрами пор (~7, 11 та 14 А) та різною кількістю атомів n в елементарній комірці (n= 27, 39, 51, 55 та 75 атомів). Опрацьовано п'ять різних структурних типів такого пористого кристалу. На основі першопринципного розрахунку (DFT-D3, GGA) отримано стійку кристалічну структуру (максимальні сили, що діють на атом $f_{max} < 0{,}0016$ еВ/А), розраховано розподіл електронної густини, електронні спектри та густини електронних станів вздовж симетричних напрямків зони Бриллюена для всіх п'яти структурних типів пористого кремнію Si. Досліджено залежність ширини забороненої зони від структурної морфології пористого Si. Показано, що у нанокомпозитному матеріалі SiO_2&$LiNbO_3$, складеному з "материнської" матриці SiO_2 та кристалу наповнення $LiNbO_3$ утворюються дві «чисті» структурні фази SiO_2 і $LiNbO_3$ та змішана структурна фаза SiO_2 + $LiNbO_3$ (опубліковано у журналі Q1 Sci.Rep. v.14, 24237 (2024)).

3) Виконано комп'ютерне моделювання комплексів іонів важких металів Hg,Cd,Pb,Cr утворених разом з халатуючими агентами EDTA та PEI. Моделювання проводилося за допомогою методу молекулярної динаміки (МД) та методу функціоналу густини (МФГ). В якості силового поля в МД застосовано модель OPLS/AA для опису органічних сполук та найбільш успішні на сьогодні силові поля розроблені для іонів важких металів в воді, яка описувалась моделлю SPC/E. В МФГ використано декілька наближень (B3LYP, M05-2X, M06-2X) із базисом хвильових функцій LANL2DZ, який крім всього добре описує важкі метали. На основі цього, отримано структурні характеристики спостережуваних комплексів та розраховано енергію адсорбції. Показано, що МД непогано узгоджується з ДФТ, хоча деякі характеристики вказують на необхідність удосконалення силових полів. Особливістю виконаної роботи є те, що розглянуто EDTA при різних ступенях протонації, що дозволило передбачити стійкість отриманих комплексів в залежності від кислотності (pH) середовища. Частина результатів по EDTA вже опублікована в рейтинговому журналі та представлялась на міжнародних конференціях (усно і постерна доповідь). Результати по PEI подані у вигляді статті в інший рейтинговий журнал, яка знаходиться на рецензуванні.
4) Побудовані мезоскопічні моделі полімерних щіток з азобензено-вмісних полімерів лінійної та зіркоподібної архітектур, організованих у виді просторового паттерну типу квадратної супергратки. Виконане комп'ютерне моделювання процесу адсорбції ліпопротеїнів низької щільності (ЛНЩ) на таких щітках, що моделює терапію типу гемоперфузії. Для випадку щітки малої та середньої висоти (до половини діаметру ЛНЩ) із зіркових полімерів встановлене існування просторового паттерну, який призводить до підвищення ефективності адсорбції ЛНЩ на 20-25% порівняно із випадком щітки з лінійних полімерів такої ж молекулярної ваги. Основний механізм - формування регулярних зв'язків між кожним ЛНЩ та 4 сусідніми зірками завдяки співмірності масштабу паттерну із діаметром ЛНЩ. Для випадку довгих полімерів такого зросту ефективності не спостерігається, в цьому режимі ефективність адсорбції визначається виключно конформаційними властивостями ланцюжків, а не просторовим паттерном їх пришпилення. На основі виконаних досліджень готується до друку стаття.

5) Розглянуто модельну систему з послідовністю KFFE, де центральні амінокислоти містять фенольні гідрофобні групи, які відомі тим що сприяють агрегації пептидів. Проведено симуляції для мономера у воді. В рамках моделі RAPID отримано 15 внутрі-пептидних потенціалів (4 бічні групи та дві на терміналах, які несуть заряд). Також отримано 15 попередніх міжмолекулярних потенціалів з моделювання димерів у явному розчиннику. Результати представлено на одній конференції [Sokyrko et al , 1st annual workshop on the use of computer simulations in nanophysics "Nanophysics meets computer simulations", November 8, 2024, Lviv, Ukraine, Book of Abstracts, p. 13.]

6) У рамках задачі автономної генерації молекул із заданими властивостями вирішено низку завдань із збору і підготовки даних для малих органічних сполук для підходів машинного навчання. При цьому зроблено фокус на двох типах властивостей - фізико-хімічних і біологічних. Серед фізико-хімічних, зокрема, зібрано дані для температури плавлення і розчинності у воді (LogS). Обидві ці характеристики використовуються у високошвидкісному скринінгу для оцінки можливості застосування сполук в якості ліків (помірна температура плавлення і здатність розчинятися в водних розчинах забезпечують достатню стабільність поза організмом і біодоступність у організмі). У контексті збору даних для біологічних характеристик, відібрано дані для констант інгібування ряду білків із сімейства кіназ. Також натреновано перші пробні моделі передбачення температури плавлення і розчинності. Вхідними даними при цьому є структури молекул. В силу обмеженої доступності даних для розчинності, також розроблено двостадійний підхід передбачення через температуру плавлення - в цьому підході спочатку передбачається температура плавлення (модель машинного навчання), далі, на її підставі розраховується розчинність LogS (через залежності Ялковського і узагальнене рівняння розчинності), а тоді передбачаються поправки ліпофільності через ще одну модель машинного навчання.

7) Розроблено навчальний курс "Основи моделювання методом Монте Карло" для початківців в комп'ютерному моделюванні. Навчальний курс обговорено та затверджено на засіданні Вченої ради ІФКС НАН України 26 листопада 2024 р.

8) Положення (статут) про МЦКМ було обговорено та схвалено на засіданні Вченої ради ІФКС НАН України 26 листопада 2024 р. Створення МЦКМ було схвалено одноголосно на засіданні Вченої ради ІФКС НАН України 26 листопада 2024 р.

9) З метою заснування постійно діючих семінарів при МЦКМ 8 листопада 2024 року автори проєкту провели в ІФКС міжнародний воркшоп під назвою "Nanophysics meets computer simulations". Воркшоп транслювався через Zoom з робочою англійською мовою і був доступний для всіх зацікавлених в Україні та за кордоном. Серед учасників воркшопу були присутні фізично та виголосили доповіді троє вчених зі Швейцарії (ETH, Zurich) та один з Франції (ENS, Paris), інші доповіді науковців з Франції, Швейцарії та США були виголошені віддалено. Інформація про воркшоп та його наукову програму розміщена онлайн за посиланням https://icmp.lviv.ua/nanosim/index.html .

10) Досягнуто принципової домовленості з гарантом освітньої програми фізичного факультету ЛНУ ім. І. Франка проф. Волошиновським А.С. та заступником декана доц. Бовгирою О. про співпрацю МЦКМ по навчанню студентів методам комп'ютерного моделювання. Формальний договір про співпрацю в процесі укладання. Проведено також зустріч з експериментальною групою кафедри фізики металів ЛНУ та започатковано співпрацю з проф. С.І.Мудрим. Розширено наукові контакти з теоретичними та експериментальними групами Технологічного університету Лапеенранта LUT (Фінляндія), з якими планується співпраця в наступному році.

11) Здійснено закупівлю обладнання для обчислювального кластера, проведено підготовку програмного забезпечення для обслуговування кластера, встановлення та налагодження його роботи.

12) Підготовлено приміщення для комп'ютерного класу та придбано заплановане обладнання на 10+1 місць.

15.3. Відхилення від Календарного плану виконання наукового дослідження і розробки (за наявності) *(вкажіть та детально обґрунтуйте можливі відхилення від Технічного завдання до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки / Календарного плану виконання наукового дослідження і розробки, до 30 рядків)*

Принципових відхилень від Календарного плану не було.

16. Наукова цінність і актуальність отриманих результатів *(науково-технічної продукції), їх порівняння з українськими та/або кращими закордонними аналогами, до 30 рядків)*

Вперше в науковій літературі опубліковано систематичне дослідження формування високочастотної вітки колективних збуджень в бінарних розплавах з комбінації аналітичної теорії та першопринципного комп'ютерного моделювання на основі аналізу колективної динаміки в 6 різних бінарних рідинах. Встановлено роль крос-кореляцій між флуктуаціями повних та мас-концентраційних потоків для бінарних розплавів з різним співвідношенням мас компонент. Вперше встановлено роль співвідношення мас на ширину пропагаторної щілини для зсувних хвиль та отримано аналітичні вирази. Ці результати дозволяють вияснити чому у воді, як в молекулярній полярній рідині, появляється "швидкий звук" - проблема, яка відома ще з 1970-х років. Це є перша наукова стаття в літературі, в якій на основі комбінації аналітичної теорії та першопринципного комп'ютерного моделювання пояснюється поява аномального "швидкого звуку" в іонних розплавах. Вперше проаналізовано вплив співвідношення мас компонент бінарної рідини, який відповідає за появу "швидкого звуку " в поздовжній динаміці, на дисперсію поперечних колективних мод. Вперше роз'язано аналітично 4-змінну динамічну модель поперечної динаміки з явним врахуванням співвідношення мас компонент. Отримано аналітичний вираз для щілини зсувних хвиль для бінарних розплавів.

Розуміння і передбачення явищ хелатування іонів важких металів (Hg, Cd, Pb, Cr) є важливими з точки зору розробки високоефективних очисних систем для стічних та грунтових вод, забруднених цими надзвичайно токсичними для людини елементами. За певних умов,

внаслідок хелатування, у водному середовищі повинні утворюватися стійкі комплекси органічних сполук з іонами. Проте, на сьогодні дуже мало даних експерименту, які би давали мікроскопічний опис такого комплексування. Комп'ютерне моделювання може допомогти цьому. На даному етапі нами випробувано декілька моделей, що описують хелатування іонів металів методом молекулярної динамік (МД) та встановлено умови, які сприяють кращому хелатуванню деяких з них. Аналогічні результати були отримані методами квантової хімії, які підтверджують висновки, зроблені за допомогою МД та деяких експериментальних даних.

Вперше, засобами комп'ютерного моделювання, досліджений вплив типу молекулярної архітектури та просторового паттерну приєднання галужених фоточутливих полімерів до субстрату у виді полімерної щітки на ефективність адсорбції нею ліпопротеїнів низької щільності. Знайдений оптимальний просторовий паттерн, що дозволяє підвищити ефективність адсорбції ліпопротеїнів щіткою з зіркових полімерів на 15-20% порівняно з випадком неструктурованої полімерної щітки з лінійних полімерів

З допомогою першопринципного моделювання показано теоретичну можливість реалізації наноструктурованого пористого кристалічного кремнію. Досліджено вплив просторової морфології пор такого матеріалу на його електронний спектр. Вперше показано можливість практичного створення композитного матеріалу SiO_2&$LiNbO_3$ із нанокристаликами $LiNbO_3$, впровадженими до пористої матриці SiO_2. Такий матеріал зберігає нелінійно-оптичні властивості монокристалічного $LiNbO_3$, проте, процес його створення є значно значно простішим і дешевшим, що становить практичний технологічний інтерес.

Проведено збір даних для тренування моделей машинного навчання із автономної генерації сполук із заданими біоактивними властивостями. Відмінною ознакою і новизною підходу є генерація інгібіторів до певних білків із одночасним контролем низької інгібуючої дії відносно інших білків.

17. Практична цінність результатів для потреб оборони, безпеки, економіки та/або суспільства України *(у разі наявності, до 30 рядків)*

Отримані наукові результати досліджень мають фундаментальний характер. Створення МЦКМ та його функціонування дозволить проведення навчання молодих спеціалістів методам комп'ютерного моделювання і виконання досліджень на обчислювальному кластері в рамках курсів, розроблених виконавцями проєкту. Це дасть змогу якісно підняти рівень освіти випускників університетів різних факультетів і спеціальностей в галузі комп'ютерного моделювання. Крім того, такого роду активність повинна сприяти тіснішому співробітництву, в тому числі міждисциплінарному, між академічними інститутами та ВНЗ. Комп'ютерний клас також слугуватиме місцем проведення семінарів МЦКМ та робочих нарад. Після закінчення проєкту, комп'ютерний клас і його обладнання продовжать виконувати ті ж функції, що були і впродовж проєкту. Таким чином, придбане обладнання слугувати продовженню намічених цілей проєкту і створеного центру МЦКМ, що сприятиме сталому розвитку галузі комп'ютерного моделювання та розвитку української науки.

18. Основні кількісні індикатори виконання звітного етапу *(у таблиці мають бути відображені індикатори, які було заплановано в Технічному завданні до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки із зазначенням відповідного фактичного кількісного виконання цих індикаторів. Якщо у Технічному завданні до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки кількісні показники не планувались, то у таблиці відображаються лише показники у разі їх наявності / виконання)*

№ з/п	Індикатори виконання	Заплановано (відповідно до КП), кількість	Фактично отримано (відповідно до КП), кількість

1.	**Публікація результатів:**		
1.1.	Статті у журналах, що індексуються наукометричними базами даних:		
	- Scopus та/або Web of Science Core Collection, всього, од.	2	4
	з них із квартилем Q1 і Q2 на момент опублікування, од.	2	4
	з них із квартилем Q3 і Q4 на момент опублікування, од.		
1.2.	Статті у наукових журналах (без квартилю), збірниках наукових праць, матеріалах конференцій тощо, що індексуються наукометричними базами даних Scopus або Web of Science Core Collection (крім тих, що увійшли до п.1.1) , од.		
1.3.	Статті у фахових виданнях України категорії «Б» , од.		
1.4.	Статті у періодичних виданнях інших країн, що мають ISSN, од.		
1.5.	Публікації у матеріалах конференцій, тезах доповідей та виданнях, що не включені до переліку наукових фахових видань України та не індексуються наукометричними базами даних Scopus або Web of Science Core Collection, од.		5
1.6.	Монографії та розділи монографій, опубліковані (або підготовлені і подані до друку) у закордонних видавництвах іноземними мовами, од.		
1.7.	Монографії та розділи монографій, опубліковані (або підготовлені і подані до друку) в українських видавництвах, од.		
1.8	Словники, довідники, енциклопедії, видані українськими та/або закордонними видавництвами , од.		
1.9	Інші публікації, які не описані у пп. 1.1-1.8, од.		
2.	**Презентація та дисемінація результатів:**		
2.1.	Міжнародні науково-комунікативні заходи, конференції, од.	1	4
2.2.	Всеукраїнські та регіональні науково-технічні/промислові виставкові заходи, од.		
2.3.	Представлення розробки/бізнес-плану/результатів проєкту на:		
	інноваційних фестивалях, од.		
	конкурсах стартапів, од.		

	акселераційних програмах, од.		
	хакатонах, од.		
2.4.	Науково-популярні публікації з метою поширення інформації про результати проєкту для загальної (широкої) аудиторії, од.		
2.5.	Представлення інформації про результати проєкту на науково-популяризаційних заходах (Дні науки, Наукові пікніки тощо) , од.		
2.6.	Інші заходи, які не описані у пп. 2.1-2.5, од.		
3.	**Охоронні документи на об'єкти права інтелектуальної власності (ОПІВ)**		
3.1.	Отримано патентів України на винахід, од.		
3.2.	Отримано свідоцтв України на промисловий зразок , од.		
3.3.	Отримано патентів України на корисну модель, од.		
3.4	Отримано охоронний документ на ОПІВ інших країн, од.		
3.5	Інші ОПІВ, які не описані у пп. 3.1-3.4, од.		
3.6	Подано заявок на отримання охоронного документу на ОПІВ України та /або інших країн, од.		
4.	**Впровадження та використання наукових або науково-практичних результатів:**		
4.1.	Підписання (укладання) договорів (угод) на впровадження (використання) результатів проєкту (окрім індивідуальних), серед них:		
4.1.1	Господарських договорів/контрактів, од./тис.грн.		
4.1.2	Ліцензійних договорів/договорів на ноу-хау, од./тис.грн.		
4.1.3	Грантових угод, од./тис.грн.		
4.1.4	Інші договори (угоди), які не описані у пп. 4.1.1-4.1.3, од./тис. грн.		
4.4	Документально підтверджено використання результатів у практиці органів державної/місцевої влади, суспільних практиках тощо, од.		
4.5	Проведено маркетингові дослідження, перемовини з потенційними замовниками із підписанням протоколу (меморандуму, угоди) про наміри комерційного впровадження результатів, од.		
4.6	Подано заявок на державні, міжнародні наукові гранти (окрім індивідуальних) , од.		
5.	**Створено чи істотно удосконалено/покращено існуючі:**		

5.1.	Пристрої (макет, експериментальний/дослідний зразок) , од.		
5.2.	Матеріали, процеси, технології, технологічні регламенти, цифрові продукти та електронні сервіси, од.		
5.3.	ТУ, ДСТУ, будівельні норми, зареєстровані проєкти законодавчих актів, од.		
5.4.	Наукові (науково-технічні) послуги, од.		
5.5	Іншу продукцію, яка не описана у пп. 5.1-5.4, од.		

19. **Відхилення від запланованих індикаторів, зазначених у п. 18** *(у разі наявності зазначити і обґрунтувати причини таких відхилень та їх вплив на подальше виконання проєкту, до 20 рядків)*

Відхилення є лише в напрямку збільшення результатів та наукової продукції.

20. **Вихідні дані щодо показників виконання відповідно до п. 18** *(зазначити дані про публікації, конференції, отримання ОПІВ, впровадження, створення НТП, залучення молодих вчених тощо з додаванням Web-посилання (за наявності) на ресурси, де вони розміщенні)*

Статті:

1. T. Bryk, A.P. Seitsonen, G. Ruocco, “Is the mechanism of "fast sound"the same in liquids with long-range interactions and disparate mass metallic alloys?” The Journal of Chemical Physics, 161, no. 19, (2024) 194503. https://doi.org/10. 1063/5.0239921 Scopus/WoS **Q1**
2. T. Bryk, M. Kopcha, I. Yidak, “Propagation gap for shear waves in binary liquids: Analytical and simulation study”, The Journal of Chemical Physics, 161, no. 18, (2024) 184505. https://doi.org/10.1063/5.0236047 Scopus/WoS **Q1**
3. H. Butovych, F. Keshavarz, B. Barbiellini, E. La¨hderanta, J. Ilnytskyi, T. Patsahan, “Role of EDTA protonation in chelation-based removal of mercury ions from water”, Physical Chemistry Chemical Physics, 26 (2024): 25402-25411. https://doi.org/10.1039/D4CP02980A Scopus/WoS **Q1**
4. Y. Shchur, H.E. Karout, B. Sahraoui, B., A. Andrushchak, G. Beltramo, D. Pustovyi, S. Vitusevich, P. Huber, A.V. Kityk, “Synthesis, nanocrystalline morphology, lattice dynamics and nonlinear optics of mesoporous SiO2&LiNbO3 nanocomposite”, Scientific Reports, 14 (2024) 24237. https://doi.org/10.1038/s41598-024-75686-6 Scopus/WoS **Q1**

Тези конференцій:

1. H. Butovych, T. Patsahan, J. Ilnytskyi, E. La¨hderanta, B. Barbiellini, F. Keshavarz, “Chelation of heavy metals by ethylenediaminetetraacetic acid in aqueous solution”, EMLG-JMLG Annual Meeting 2024, Structure and Dynamics of Hydrogen-Bonded Systems, 8-13 September, 2024, Trieste, Italy, Book of Abstracts, p. 96. https://indico.elettra.eu/event/39
2. H. Butovych, F. Keshavarz, J. Ilnytskyi, B. Barbiellini, E. La¨hderanta, T. Patsahan, “Computer simulation of complexes formed by heavy metal ions and EDTA molecules in aqueous solution”, 1st annual workshop on the use of computer simulations in nanophysics “Nanophysics meets computer simulations”, November 8, 2024, Lviv, Ukraine, Book of Abstracts, p. 9. https://icmp.lviv. ua/nanosim
3. R. Sokyrko, A. Baumketner, “Aggregation pathways of amyloidogenic KFFE peptide”, 1st annual workshop on the use of computer simulations in nanophysics “Nanophysics meets computer simulations”, November 8, 2024, Lviv, Ukraine, Book of Abstracts, p. 13. https://icmp.lviv.ua/nanosim

4. T. Bryk. “Exotic Properties of Condensed Matter Under High Pressure From ab initio Computer Simulations”, 4th International Conference on Innovative Materials and NanoEngineering (IMNE’2024), September 13-16, 2024, Dovgoluka, Ukraine. Conference programme and Book of abstracts. p.33 https://imne.lpnu.ua/

5. Ya. Shchur, A.V. Kityk, V. Adamiv, S. Vitysevich, A. Andrushchak “Experimental and Theoretical Investigations of Nanocomposite Materials Based on Si and SiO2 Porous Matrices”, 4th International Conference on Innovative Materials and NanoEngineering (IMNE’2024), September 13-16, 2024, Dovgoluka, Ukraine. https://imne.lpnu.ua/

Виступи на семінарах та робочих нарадах:

• T. Bryk, “Exotic Properties of Condensed Matter Under High Pressure From ab initio Computer Simulations”, 4th International Conference on Innovative Materials and NanoEngineering (IMNE’2024), September 13-16, 2024, Dovgoluka, Ukraine. https://imne.lpnu.ua

• T. Bryk, “On a crossover between two mechanisms of sound propagation in liquids”, Bogolyubov Kyiv Conference “Problems of Theoretical and Mathematical Physics, September”, 24-26, 2024, Kyiv, Ukraine. https://indico.bitp.kiev. ua/event/13

• T. Bryk, “Interdisciplinary center for computer simulations: current status and perspectives”, 1st annual workshop on the use of computer simulations in nanophysics “Nanophysics meets computer simulations”, November 8, 2024, Lviv, Ukraine. https://icmp.lviv.ua/nanosim

• J. Ilnytskyi, “Adsorption of low density lipoproteins on azobenzene-containing polymer brush”, 1st annual workshop on the use of computer simulations in nanophysics “Nanophysics meets computer simulations”, November 8, 2024, Lviv, Ukraine. https://icmp.lviv.ua/nanosim

• М. Дручок, “Застосування підходів машинного навчання у задачах біоінформатики”, XIX Робоча нарада з актуальних проблем фізики м’якої речовини, 29 листопада, 2024 р., ІФКС, м. Львів. https://icmp.lviv.ua/node/8593

До звіту додаються електронні копії наукових публікацій, охоронних документів, інша наукова продукція із вказанням DOI *(окрім матеріалів, які містять інформацію з обмеженим доступом, Додаток 1 до Проміжного звіту)***.**

- у випадку необхідності надання друкованої версії звіту, до нього додаються друковані додатки *(окрім великих (більше 50 сторінок) за обсягом - монографії, підручники, словники тощо та інші матеріали).*

21. Рішення вченої ради або іншого керівного (дорадчого) органу організації/установи грантоотримувача щодо результатів розгляду Проміжного звіту

На засіданні Вченої ради ІФКС НАН України 11 грудня 2024 року було заслухано звіт керівника проєкту 2023.05/0019 Т. Брика та ухвалено , що роботу за 1 етап проєкту вважати виконаною в повному обсязі у відповідності з Технічним завданням і Календарним планом.

Додаток 2 – копія витягу з протоколу вченої (наукової, науково-технічної, технічної) ради або іншого керівного (дорадчого) органу (за відсутності зазначеної ради) організації/установи грантоотримувача.

22. Анотація основних результатів звітного етапу проєкту *(готується українською та англійською мовами, до 30 рядків кожною мовою, викладається науково-популярним стилем)*

Основними результатами етапу 1 проєкту є: 1. Створено Міждисциплінарний центр комп’ютерного моделювання як інфраструктурну одиницю Інституту фізики конденсованих систем НАН України. Вченою радою ІФКС затверджено Положення (статут) про МЦКМ. 2. Проведено переговори з гарантами освітніх програм та адміністрацією фізичного факультету Львівського національного університету ім. І. Франка стосовно проведення навчальних курсів при МЦКМ та про підготовку відповідного договору між ЛНУ ім. І. Франка та ІФКС НАН України. 3. Започатковано регулярні семінари/воркшопи через проведення 1-го міжнародного щорічного воркшопу “Nanophysics meets computer simulations”, в якому

8 листопада приймали участь дослідники зі України (зі Львова, Києва, Харкова), Швейцарії, Франції та США. 4. Створено навчальний курс для початківців в комп'ютерному моделюванні "Основи моделювання методом Монте-Карло". 5. Проведено ряд наукових передових досліджень з використанням комп'ютерного моделювання згідно запланованих в Календарному плані та Технічному завданні напрямків. Результати опубліковані в 4 наукових статтях в журналах з квартилю Q1 та 5 тезах наукових конференцій. 6. Проведено підготовку приміщення для комп'ютерного класу МЦКМ в головному корпусі ІФКС НАН України. 7. Здійснено закупівлю комп'ютерного класу на 10+1 місць. 8. Здійснено закупівлю шафи та серверів для обчислювального кластеру МЦКМ, який стане основою для високопродуктивних обчислень при МЦКМ.

Додаток 3

23. **За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з аналогами, що існують, до 10 рядків** _____

На цьому етапі лише розпочата розбудова обчислювального кластера МЦКМ. Проте, встановлене обладнання уже має низку переваг з існуючими аналогами. Перш за все це унікальна багатоядерність обчислювального вузла кластера (на сьогодні придбано 1 вузол), базується на двох 128-ядерних процесорах. А отже один обчислювальний вузол може виконувати до 256 паралельних процесів (потоків), що дозволить виконувати масивні паралелельні розрахунки вже навіть зараз.

24. **Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці**.

Важливим фактором подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці є поєднання передових фундаментальних досліджень та навчання для студентської молоді та аспірантів. На етапі 1 виконання Проєкту здійснено закупівлю комп'ютерного класу на 10+1 місць, який буде функціонувати при МЦКМ та буде вже у 2025 році задіяний в процесі навчання студентів та аспірантів методам комп'ютерного моделювання. Обчислювальний кластер МЦКМ, побудову якого розпочато на етапі 1 виконання Проєкту, дозволить виконувати передові дослідження з використанням методів комп'ютерного моделювання як працівниками ІФКС, так і науковцям та аспірантам вищих навчальних закладів України.

Науковий керівник Проєкту

Директор Інституту фізики
конденсованих систем НАН України
(посада)

Тарас БРИК
(Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)