Аналітичні матеріали
«Аналіз стану та стратегія розвитку наукових досліджень у ділянці фізики м'якої речовини (до 2030 року)»
Наукової ради з проблеми «Фізика м'якої речовини»,
підготовані за дорученням Президії НАН України від 24 червня 2026 р.

Вступ

Постановою Президії НАН України № 143 від 31 травня 2000 року було створено Наукову раду з фізики рідкого стану, яка наприкінці 2004 року була реорганізована в Наукову раду з проблеми «Фізика м'якої речовини» при Відділенні фізики та астрономії НАН України. Інститут фізики конденсованих систем НАН України було визначено як базову установу, яка організовує і супроводжує діяльність Ради. До 2024 року Раду очолював академік НАН України І.Р. Юхновський – визначний фізик і відомий політик та громадський діяч. 26 березня 2024 року академік І.Р. Юхновський відійшов у засвіти. У складі Ради (постанова Бюро ВФА НАН України від 24.11.2024 р., протокол № 9) відбулися зміни. Головою Ради призначено акад. НАН України І.М. Мриглода, заступники – акад. НАН України Л.А. Булавін, чл.-кор. НАН України М.Ф. Головко, секретарі – О.Л. Іванків та А.Д. Трохимук. До складу Ради входять такі секції: статистичної фізики (голова – чл.-кор. НАН України М.Ф. Головко, секретар – О.В. Пацаган); фізики рідкого стану (голова – акад. НАН України Л.А. Булавін, секретар – І.Ю. Дорошенко); рідких кристалів (голова – акад. НАН України Б.І. Лев, секретар – А.П. Ребеш); макромолекулярних та біологічних систем (голова – акад. НАН України Ю.В. Головач, секретар – П.В. Сарканич); комп'ютерного моделювання м'якої речовини (голова – чл.-кор. НАН України Т.М. Брик, секретар – Т.В. Демчук). Останні зміни у складі ради відбулися у 2026 р. Ради (постанова Бюро ВФА НАН України від 09.06.2026 р., протокол № 5). До списку установ, діяльність яких у галузі фізики м'якої речовини координується Науковою радою, входять 17 інститутів НАН України, 11 вищих навчальних закладів МОН України та 2 установи з інших відомств. Діяльність Наукової ради з проблеми «Фізика м'якої речовини» зосереджена, насамперед, на таких основних напрямках:

- Екпертна оцінка відомчих проєктів, участь в експертних оцінках на замовлення державних структур;

- Координація діяльності теоретичних та екпериментальних груп через проведення робочих нарад та наукових семінарів, стимулювання міждисциплінарних і прикладних досліджень;
- Сприяння поширенню сучасних методів комп'ютерного моделювання рідин, рідкокристалічних, макромолекулярних, хімічно-актичних і біологічних систем через доступ до обчислювальних кластерів та програмних пакетів;
- Залучення молоді до передових досліджень у галузі фізики м'якої речовини через проведення науково-популярних заходів, а також конференцій та семінарів для молодих вчених;
- Стимулювання міжнародної співпраці дослідницьких груп в Україні та провідних наукових центрів світу.

Фахівці ради широко залучалися до експертного оцінювання проєктів НФДУ і працювали у складі конкурсних комітетів. На системному рівні проводиться робота з рецензування наукових публікацій, які надходять як до наукових журналів в Україні, так і за її межами.

Поняття ***м'яка речовина*** (або *м'яка матерія*) включає у себе широкий клас матеріалів, які легко деформуються або змінюють свою структуру під дією слабких зовнішній впливів, зокрема механічних напружень чи передачі тепла. При цьому енергія таких впливів є близькою за величиною до теплової енергії навколишнього середовища. Тобто на відміну від твердих матеріалів, таких як метали чи кераміка, м'яка матерія володіє певними властивостями (легка деформованість, висока термочутливість, легка зміна мезоструктур та ефекти самоорганізації), які є проміжними між тими, що властиві рідинам і кристалічним тілам, відповідно. До м'якої речовини, окрім складних рідин, відносять такі об'єкти як пластмаси і макромолекулярні системи (пластмаса, гума, білки та ДНК-структури тощо), колоїди і колоїдні системи (фарби і барвники, молочні продукти і т.п.), гелі та піни, рідкокристалічні системи, гранульовані матеріали, біоматеріали тощо. Тобто, м'яка матерія охоплює велику кількість об'єктів, які відомі з нашого повсякденного життя і характерні як для неживої природи, так і біологічних систем. Звідси *міждисциплінарний характер досліджень і широкий спектр їхніх потенційних застосувань* у різних ділянках матеріального виробництва – від споживчих товарів у харчовій, косметичній, фармацевтичній промисловості (зокрема, пошук нових ліків і систем їх доставки) та медицині (гідрогелі для контактних лінз, матеріали тканинної інженерії, біосенсори і т.п.) і до електроніки (гнучкі

дисплеї і компоненти електроніки) та енергетики (сонячні батареї, акумулятори та пристрої для генерації енергії).

Міждисциплінарний напрям «Фізика м'якої речовини» розвивається на перетині статистичної та нелінійної фізики, фізичної хімії, молекулярної біофізики, біохімії, фізіології, нанотехнологій, матеріалознавства, фотоніки тощо та охоплює широкий спектр як фундаментальних і прикладних досліджень із використанням різноманітних методів комп'ютерного моделювання. *Стратегічною метою в роботі ради* є збереження та інтеграція зусиль відомих наукових шкіл і окремих груп дослідників, розвиток експериментально-обчислювальної інфраструктури та концентрація наявних ресурсів на напрямах, де фундаментальні результати можуть одночасно забезпечити міжнародну наукову конкурентоспроможність і практичну цінність для охорони здоров'я, біобезпеки, екологічної безпеки та технологічної незалежності України.

Сучасний стан і основні тенденції розвитку досліджень м'якої речовини у світі та в Україні

Серед основних завдань фізики м'якої речовини – широкий клас проблем, що стосуються як особливостей і проявів міжмолекулярних взаємодій, процесів самоорганізації та формування структурних мезоутворень, конформаційних перетворень і їхніх особливостей, так і процесів перенесення заряду, енергії та речовини, нерівноважної динаміки й загальних механізмів функціонування відповідних об'єктів – від окремих полімерних ланцюгів, білків, нуклеїнових кислот і мембран до складних плинів, клітин, нейронних мереж, біогібридних матеріалів та функціональних наноструктур. Спільною рисою таких об'єктів є наявність багатьох просторових і часових масштабів, значна роль флуктуацій та слабких взаємодій, а також тісний зв'язок між структурою, динамікою та відповідними функціональними властивостями.

Сучасний стан галузі визначається переходом від дослідження окремих об'єктів до інтегрованих платформ, в яких експеримент поєднується з комп'ютерним моделюванням, зокрема молекулярною динамікою, квантово-хімічними розрахунками, аналізом великих масивів даних та методами машинного навчання і використанням засобів штучного інтелекту. При цьому роль комп'ютерного моделювання зростає, оскільки відкривається шлях до

поєднання атомістичного й мезоскопічного рівнів опису, тестування спрощених аналітичних моделей із подальшою їхньою експериментальною перевіркою, що створює передумови для розвитку багатомасштабного моделювання складних біологічних і макромолекулярних систем на основі комбінації різноманітних можливостей сучасної науки.

Для складних макромолекул, зокрема біологічних, особливого значення набувають також задачі з передбачення структури й конформаційної динаміки, опису зв'язування лігандів, іонів і наночастинок, визначення вільних енергій, дослідження кооперативних та фазових переходів, а також встановлення механізмів взаємодії молекулярних подій із загальною функцією, зокрема на клітинному рівні.

Паралельно ведеться пошук нових можливостей практичного використання таких систем. Для прикладу, активно досліджуються напрямки щодо небіологічного застосування біомолекул. При цьому ДНК, білки, пептиди та біополімери дедалі частіше розглядаються як програмовані будівельні блоки для отримання функціональних матеріалів, сенсорів, систем доставки та елементів біоелектроніки. Для України цей напрям має додатковий стратегічний вимір. Воєнні дії та орієнтація на майбутнє нашої держави посилюють потребу у вітчизняних технологіях діагностики й лікування, регенеративних матеріалах, системах контролю біологічних і хімічних ризиків, сорбентах для очищення довкілля, методах оцінювання радіаційного та токсичного впливу. Водночас, ця галузь знань залежить від дорогого імпортного обладнання, доступу до високопродуктивних обчислень і стабільної підготовки міждисциплінарних кадрів. Тому збереження окремих сильних наукових груп без їхнього мережевого об'єднання вже недостатньо: необхідна координація компетенцій і розбудова та спільне використання наукової інфраструктури.

В Україні наявна розвинена експериментальна база у спектроскопії, фотоніці та фізичних методах дослідження різноманітних об'єктів. Активно застосовуються коливальна, оптична, лазерна і флуоресцентна спектроскопія, часово-роздільні оптичні методи, конфокальна та електронна мікроскопія, сканувальна зондова мікроскопія та інші методи характеризації поверхонь і наноструктур. Вони, зокрема, використовуються для дослідження структурних перетворень нуклеїнових кислот, білків, мембран і клітин, вивчення фотодинаміки молекулярних систем і взаємодії макромолекул із наночастинками та двовимірними матеріалами, а також для пошуку

спектроскопічних маркерів структурно-функціональних змін. До цього напряму примикають дослідження впливу іонізуючого випромінювання та інших фізичних чинників на біологічні об’єкти, що важливо для розвитку біодозиметрії, радіобіології та біобезпеки. Наявний значний досвід вивчення іонних каналів, синаптичної передачі, пластичності та функціонування нейронних мереж, а також проліферації, апоптозу, оксидативного стресу й механізмів дії біологічно активних та токсичних сполук. Електрофізіологічні, біохімічні, молекулярно-біологічні та клітинні методи дають можливість переходити від опису молекулярних взаємодій до оцінювання їхніх функціональних впливів на рівні клітини й тканини, що особливо актуально для розвтку нейробіофізики, онкобіології, нейротоксикології, оцінювання біобезпеки нових матеріалів і валідації результатів молекулярного моделювання.

На відміну від традиційних підходів до опису явищ природи на основі диференційних рівнянь суцільного середовища, які широко використовуються для вивчення механічних, гідродинамічних та теплових процесів, новітні підходи комп’ютерного моделювання базуються на мікроскопічній атомістичній структурі середовища та ефективних взаємодіях між атомами, чи електронів з іонами у випадку явного врахування електронної підсистеми. Тут в Україні теж є ціла низка напрацювань і необхідна інфраструктура для розвитку відповідних досліджень. Значна перспектива на найближчі роки полягає у поєднанні підходів штучного інтелекту (машинне навчання) та першопринципного (ab initio) моделювання, коли на ab initio рівні встановлюється рівноважна структура досліджуваної системи, а потім на отриманих конфігураціях тренується/навчається нейронна мережа до досягнення ab initio точності відтворення одночастинкових енергій нейронною мережею. На цій основі в подальшому виконується моделюванням структури та динаміки великих мезоскопічних систем на основі тренованої нейронної мережі з ab initio точністю.

Детальніша інформація про результати діяльності Наукової ради з конкретними прикладами найважливіших здобутків як установ, так і окремих науковців можна знайти у Звітах ради, які готуються і публікуються з періодичністю раз у 5 років. Перший із них було опубліковано у 2006 році, а нещодавно вийшло друком видання «Наукова рада з проблеми «Фізика м’якої речовини»: Короткий підсумок діяльності протягом 2021 – 2025 років», Львів-Київ, 2026, 249 с.».

Однією з домінуючих тенденцій у сучасній фізиці м'якої речовини стає перехід до керованого дизайну складної речовини. Від опису того, як поводиться природна макромолекула чи відповідний матеріал, дослідники переходять до прогнозування та створення систем із наперед заданими властивостями і потрібними функціями. Це змінює співвідношення між експериментом і теорією. Так на початковому етапі комп'ютерні моделі та штучний інтелект дедалі частіше використовуються для генерування нових гіпотез і пошуку найімовірніших кандидатів на очікуваний матеріал, тоді як експеримент виконує важливу роль на етапі перевірки відповідних гіпотез і кількісної валідації очікуваних результатів, що забезпечує зворотній зв'язок у науковому пошуку, а хороша координація різних груп дослідників покращує ефективність їхньої спільної роботи.

Помітний прикладний потенціал мають дослідження на перетині кількох наук, зокрема нанобіофізики, матеріалознавства та біомедицини. Досліджуються і розробляються нові полімерні наноносії та інші системи доставки біологічно активних речовин, функціональні наноматеріали й поверхні, кальцій-фосфатні та апатит-біополімерні композити, біорезорбовані мембрани і покриття. Значна увага приділяється механізмам адсорбції біомолекул на поверхнях, контрольованому вивільненню лікарських речовин, біосумісності, клітинному захопленню, антимікробним, механічним і в'язкоеластичним властивостям матеріалів. Такі роботи створюють основу для розвитку систем адресної доставки, біосенсорів, регенеративних матеріалів і функціональних покриттів, причому їхня подальша ефективність значною мірою залежить від інтеграції фізичних характеристик, даних моделювання та валідації на рівні біологічних систем.

Дослідження в Україні за змістом значною мірою відповідають тематиці та основним напрямкам роботи провідних наукових центрів світу. У нас наявні роботи з фізики складних полімерних архітектур і полімерної адсорбції; структурних перетворень ДНК; білкової інженерії та біоінформатики; квантових і нелінійних механізмів перенесення заряду та енергії у макромолекулярних системах; взаємодії макромолекул чи ліків із наноматеріалами; спектроскопії об'єктів м'якої речовини; нейронної електрофізіології; вивчення наноносіїв протипухлинних препаратів; апатит-біополімерних матеріалів та функціональних поверхонь. В окремих групах активно застосовуються методи комп'ютерного експерименту (молекулярна

динаміка, докінг, DFT) тощо і підходи машинного навчання й штучного інтелекту для аналізу великих масивів даних і моделювання.

Відставання в Україні має переважно інфраструктурний або ж організаційний характер. В Україні недостатньо стабільного доступу до GPU/HPC, сучасної мас-спектрометрії, високороздільної мікроскопії, одномолекулярних методів, потужної спектроскопічної та біофізичної апаратури. Експериментальні, теоретичні та біологічні групи часто працюють у різних інституційних контурах; дані та програмні коди не завжди організовані за принципами FAIR; короткі проєктні цикли ускладнюють підтримку довготривалих платформ. Певну перевагу дає наявність сильних наукових шкіл і відносно невелика кількість ключових центрів, що робить реалістичною їхню координацію у межах спільної програми.

Отже, наявний в Україні доробок охоплює практично всі основні складові, необхідні для розвитку сучасної фізики макромолекулярних та біологічних систем: теорію складних полімерів і критичних явищ; молекулярну та обчислювальну біофізику ДНК і білків; нелінійні й квантово-кінетичні моделі; спектроскопію, фотоніку та мікроскопію; клітинну та нейронну біофізику; нанобіофізику, наномедицину та біоматеріали. Дослідження українських вчених мають добрий потенціал для успішного входження у тематики, які стосуються основних світових тенденцій. Серед яких:

- Багатомасштабне моделювання та цифрові двійники. При цьому поєднуються квантові розрахунки, атомістична й крупнозерниста молекулярна динаміка, континуальні моделі, статистична фізика та машинне навчання. Мета – пов’язати локальну хімію та конформаційні зміни з мезоскопічною самоорганізацією і функцією складних систем.

- ШІ-керований дизайн білків і біомолекул. Генеративні моделі, білкові мовні моделі та методи структурного прогнозування зі зміною функцій допоміжного інструменту до повного циклу «дані – генерація – in silico відбір – експериментальна перевірка». Водночас зберігається необхідність фізично обґрунтованих моделей енергетичних ландшафтів, молекулярної динаміки та експериментальної валідації.

- Біомолекулярні конденсати й рідинно-рідинне фазове розділення, коли конденсати розглядаються як динамічні безмембранні компартменти,

що концентрують або виключають молекули й регулюють клітинні процеси. Поряд із природними конденсатами активно розвивається дизайн синтетичних систем на основі пептидів, білків, РНК, ДНК і полімерів для доставки, біосенсорики, мікрореакторів та програмованої компартменталізації.

- Програмоване самозбирання складних систем, біогібридні та «живі» матеріали. При цьому ДНК-нанотехнології, білкові та пептидні будівельні блоки, гідрогелі, полісахариди, клітинно-матеріальні гібриди й функціональні поверхні використовуються для створення сенсорів, систем доставки, регенеративних матриць, адаптивної біоелектроніки та мікрореакторів.

- Хімічна інженерія та наномедицина з кількісним контролем взаємодії «наноматеріал – середовище». Центральними задачами тут стають білкова корона, адсорбція на поверхнях, кероване вивільнення, транспорт через бар'єри, біодеградація, імунна відповідь і встановлення зв'язку між фізико-хімічними параметрами носія та клітинним ефектом.

- Кількісна клітинна й нейронна біофізика. Розвиваються багатоканальна електрофізіологія, високороздільна мікроскопія, оптогенетичні й фотонні методи, аналіз сигналів та моделювання мереж. Це дає змогу поєднувати молекулярні механізми каналів і рецепторів із поведінкою функціональних клітинних мереж.

- Відкрита наука, FAIR-дані та спільна HPC/AI-інфраструктура. Європейська модель дедалі більше базується на федеративному доступі до обчислень, даних, GPU-ресурсів, програмних середовищ і відтворюваних обчислювальних процесів через EuroHPC та EOSC. Для біомолекулярного моделювання, AI-дизайну й спектроскопічних/ мікроскопічних даних це стає базовою умовою конкурентоспроможності.

Найперспективніші напрями досліджень до 2030 року

Пріоритетні напрями до 2030 року доцільно формувати безпосередньо на основі вже наявних в окремих установах і дослідницьких групах наукового досвіду та відповідних компетенцій, посилюючи їх інфраструктурні й кадрові можливості, але не підмінюючи вже апробовану тематику на цілком нові напрями, для яких в Україні ще не сформовано сталої дослідницької бази. Такий підхід дозволить зберегти наступність наукових шкіл, водночас підвищуючи їх міждисциплінарність і конкурентоспроможність. Серед таких найпріоритетніших напрямків можна виділити такі:

(і) ***Розвиток методів, підготовка кадрів та розбудова інфораструктури для комп'ютерного моделювання об'єктів м'якої речовини.*** Цей надзвичайно актуальний напрям включає в себе, з одного боку, цілу низку проблем, які становлять фундаментальний інтерес і стосуються таких порівняно простих об'єктів як *густі плини, іонні та металічні розплави, молекулярні рідини, склоформуючі та колоїдні системи, тощо.* З іншого боку, існує велике різноманіття об'єктів, які вже мають чимало прикладів практичних застосування, проте інструментарій їх дослідження не є достатньо розвинутий. Серед останніх *макромолекулярні системи, складні рідини в умовах просторового обмеження та на міжфазних границях, нанокристалічні системи, тощо***.** Основні акценти у першому випадку все більше зміщуються в область *першопринципного моделювання та його комбінації з машинним навчанням*. Значний інтерес викликають *об'єкти з повільною динамікою,* обумовленою формуванням динамічних неоднорідностей, що вимагає врахування повільної релаксації таких мезоскопічних утворень із різними густинами на динамічні характеристики всієї системи. Такого типу багатомасштабність проявляється як у простіших системах у переохолодженому або ж надкритичному станах чи при наближенні до стану скла, так і в складніших об'єктах, де вона має природню причину, що відповідає за часові процеси, типові для різних ступенів вільності в системі. У системах із далекосяжними, зокрема кулонівськими, взаємодіями відповідні великомасштабні флуктуації в значній мірі впливають на всі характеристики таких об'єктів. Подібні ефекти суттєві також при дослідженні властивостей *речовини в екстремальних умовах*, зокрема високих та ультрависоких тисків, де можуть виникати цілком нові екзотичні фази, що пов'язані зі змінами в електронній підсистемі. Для реалістичного опису *молекулярних плинів* важливо мати правильний інструментарій для дослідження ефектів сольватації та іонної асоціації (формування сольватаційних оболонок, іонних пар і більших асоціатів, динаміки обміну молекул розчинника в першій

координаційній сфері та впливу цих процесів на дифузію й електропровідність, а також для врахування кислотно-основних рівноваг і впливу pH, що вимагає модифікації традиційних методів через необхідність явно описувати явища протонування/депротонування, перенесення протона та зміну зарядового стану молекул. Для дослідження фазової поведінки дедалі ширше використовуватимуться розрахунки вільної енергії, розширені ансамблі, метадинаміка, *umbrella sampling*, обмін репліками (*replica exchange*) та інші методи розширеного семплювання. Вони можуть застосовуватися як у молекулярній динаміці, так і в методах Монте-Карло. Такі підходи дозволяють досліджувати фазові переходи, нуклеацію, структурні перебудови та інші рідкісні процеси, які важко спостерігати в межах звичайної молекулярної динаміки. Перспективними є також гібридні методи, що поєднують Монте-Карло та молекулярну динаміку і використовують переваги обох підходів для ефективнішого дослідження конфігураційного простору. Для *колоїдних систем* перспективи значною мірою пов'язані з переходом від сферичних частинок з ізотропною взаємодією до анізотропних і функціоналізованих частинок. До них належать плямисті частинки (*patchy particles*) та Янус-частинки (*Janus particles*), частинки несферичної форми, а також системи з конкуруючими взаємодіями, зокрема з короткодіючим притяганням і далекосяжним відштовхуванням (*short-range attraction and long-range repulsion,* SALR). Варіювання форми частинок, їх валентності, геометрії та розташування активних центрів, а також співвідношення різних складових взаємодії відкриває широкий спектр модифікацій у фазовій поведінці – від фазових переходів газ-рідина та рідина-рідина до утворення кластерних фаз, гелів, мікрофаз і складних впорядкованих мезоструктур. Комп'ютерне моделювання відіграє тут особливу роль, оскільки дозволяє встановити зв'язок між мікроструктурою частинок, характером їх взаємодії та макроскопічними фазами речовини за різних термодинамічних умов. Тому поряд із методами Монте-Карло, молекулярної динаміки та динаміки Ланжевена важливо розвивати методи для розрахунку фазових діаграм і вільних енергій, а також підходи, що дозволяють вивчати явища кластеризації, перколяції, гелеутворення та орієнтаційного впорядкування. Однією з перспективних тенденцій стає тут перехід від прямої задачі з визначення структур, які типові для певної моделі, до оберненої задачі, тобто пошуку форми частинок і параметрів їх взаємодії, що необхідні для формування наперед заданої структури чи забезпечення певних властивостей речовини. Для цього традиційні підходи дедалі активніше поєднують із автоматизованим пошуком структур, оптимізаційними алгоритмами, машинним навчанням та методами оберненого дизайну (*inverse design*).

Для об’єктів із другої групи, для яких окремі складові системи є вже досить складними структурними утвореннями, практично всі з вищезгаданих проблем теж типові. Тому отримані при їх дослідженні результати і розвинуті та апробовані підходи створюють свого роду базис для їх узагальнень на випадок складних систем. Окрім складності власної структури тут також важливо враховувати процеси самоорганізації, а отже важливим завданням також залишається задача вивчення кінетичних шляхів до самоорганізації системи, оскільки термодинамічно стабільні структури не обов’язково є кінетично доступними, тому система може тривалий час перебувати в метастабільних станах. Таким чином, поряд із рівноважною фазовою поведінкою дедалі більшого значення набуватиме моделювання динаміки формування, перебудови та руйнування самоорганізованих структур.

Актуальною залишається проблема моделювання об’єктів м’якої речовини в умовах просторового обмеження (щілини, канали, пори) та на межах розділу фаз, зокрема рідина-газ та рідина-рідина. Просторове обмеження може суттєво змінювати локальну структуру рідини, характер асоціації, орієнтаційне впорядкування, впливати на процеси переносу, фазові переходи та адсорбцію частинок. Особливий інтерес становлять поверхневі фазові переходи, пошарове впорядкування та капілярні фазові переходи, а також гетерогенна нуклеація. Окремим перспективним напрямком є дослідження іонних рідин та концентрованих електролітів у нанопорах. Просторове обмеження та взаємодія із зарядженою поверхнею можуть принципово змінювати структуру іонних підсистем, впливати на екранування та механізми переносу заряду, включно з виникненням так званих суперіонних станів, за яких сильне екранування електростатичних взаємодій у вузьких провідних порах сприяє високій концентрації іонів. Дослідження цих явищ важливі, зокрема, для розробки ефективніших суперконденсаторів, акумуляторних батарей та інших електрохімічних пристроїв. Для таких систем перспективним є моделювання інтерфейсу електрод-електроліт із явним урахуванням потенціалу електрода, поляризації поверхні та перерозподілу заряду. Важливим також є дослідження поведінки такого типу систем у зовнішніх електричних і магнітних полях, а також під дією потоків, температурних і концентраційних ґрадієнтів. Зовнішні поля та ґрадієнти можуть впливати на процеси асоціації частинок, сприяти формуванню або руйнуванню гелевих структур, індукувати орієнтаційне впорядкування та викликати перебудову вже сформованих структур. Для молекулярних систем сильні електричні поля можуть також впливати на поляризацію, дисоціацію та перебіг хімічних реакцій. Методологічно очікується перехід від ідеалізованих однорідних плоских поверхонь і простих щілиноподібних пор до реалістичних хімічно та геометрично неоднорідних поверхонь і тривимірних пористих

середовищ. Для дослідження адсорбції ефективним залишатиметься метод Монте-Карло у великому канонічному ансамблі та його поєднання з молекулярною динамікою, тоді як для нуклеації та фазових переходів важливими стають методи розрахунку вільних енергій і розширеного семплювання. Одночасно розвиватимуться багатомасштабні підходи, в яких детальний атомістичний або квантово-механічний опис інтерфейсу поєднується з грубозернистим описом системи на більших просторових масштабах.

У цьому ж ряді можна згадати багатокомпонентні металічні системи, роль яких у найближчі роки буде зростати, що визначає актуальність їх досліджень. Тут, зокрема, досі нерозв'язаними залишаються питання аномальних явищ у теплопровідності скловидних систем, пов'язаних із наявністю так званого бозонного піку. Для таких об'єктів важливу роль відіграють ентропійні ефекти, які стимулюють посилення в них склоформуючих процесів. Самі по собі переходи в фазу скла є нерівноважними, тому й надалі дослідники будуть працювати над розробкою ефективних алгоритмів комп'ютерного генерування ультрастабільної структури в багатокомпонентних скловидних системах.

Окремо можна виділити також великий клас задач, що стосуються моделювання і застосувань нанокристалічних частинок у розчині. Такі системи активно досліджуються в останні роки і мають хороші перспективи практичних застосувань. Основні зусилля тут можуть бути зосереджені на трьох паралельних напрямках: (i) мікроскопічний опис ліганд-нанокристалічних взаємодій та пошук нових лігандів з унікальними властивостями; (ii) встановлення ефективних взаємодій між колоїдними нанокристалами через розрахунок потенціалів середньої сили, які діють між наночастинками та їх використання для дослідження системи в цілому; (iii) вивчення ефектів самозбірки наночастинок у високоорганізовані супрамолекулярні структури, такі як супергратки. Такі дослідження вимагають комбінації цілої низки методів, починаючи з першопринципних для першого напрямку (такі як GROMACS або NAMD), різних технік розрахунку різниць вільних енергій для задач другого блоку (поєднання ідей umbrella sampling з підходом покращеного конформаційного вибору з обміном реплік) і до методів типу дисипативної динаміки частинок для прогнозування появи мезоструктур і розрахунку термодинамічних та інших властивостей системи.

(ii) ***Фізика полімерів, макромолекулярних і рідкокристалічних систем.*** Цей напрям спирається на сформовані в Україні школи зі статистичної та нелінійної фізики, теорії критичних явищ, квантової кінетики та фізики полімерів. Серед пріоритетів для теоретичних досліджень

залишаються задачі моделювання конформаційних переходів і колективних явищ у макромолекулах, молекулярна динаміка та докінг, квантово-хімічний опис молекулярних взаємодій, моделі перенесення заряду й енергії, дослідження нерівноважної динаміки та самоорганізації. Методи машинного навчання доцільно використовувати як допоміжний інструмент для аналізу великих масивів розрахункових і експериментальних даних, пошуку закономірностей та прискорення обчислень із обов'язковою фізичною інтерпретацією і валідацією. Слід продовжувати наявні дослідження конформаційних властивостей лінійних, зіркових, гребінчастих, розгалужених та сіткових полімерів, фазових і релаксаційних явищ у полімерних системах, а також їх адсорбційних і сорбційних властивостей. Перспективними є дослідження зв'язку топології та структури макромолекул з ефективністю адсорбції, фільтрації й хелатування домішок, поведінкою полімерів у розчинах і складних середовищах, механічними властивостями та масопереносом. Окрему увагу слід приділити біополімерним матрицям, мембранам, гідрогелям і композитам, для яких уже існує вітчизняна теоретична та експериментальна база. Одним із базових пріоритетів мають залишатися дослідження структурної організації, конформаційної динаміки та міжмолекулярних взаємодій у ДНК, РНК, білках, білково-нуклеїнових комплексах, мембранних системах і гідратних оболонках. Наявні роботи охоплюють конформаційні переходи ДНК, роль іонів і біоактивних молекул у стабілізації макромолекул, функціональну динаміку білків, білково-нуклеїнове впізнавання, алостеричні та ферментативні процеси, а також перенесення енергії й заряду в молекулярних і біомолекулярних структурах. Подальший розвиток цього напряму має бути спрямований на поєднання спектроскопічних, біохімічних і молекулярно-біологічних експериментів із кількісними фізичними моделями.

Впродовж наступного десятиріччя очікується інтенсифікація *практичних застосувань* рідкокристалічних (РК) та полімерних матеріалів в адаптивній оптиці, м'якій робототехніці, гнучкій електроніці, в системах накопичення енергії, мембранних технологіях та біомедичній доставці ліків. Вказані застосування включають розв'язок пов'язаних між собою фізичних, хімічних та біологічних проблем, що охоплюють молекулярні, мезоскопічні та макроскопічні масштаби. Мезоскопічні методи моделювання, такі як крупнозерниста молекулярна динаміка (CGMD) та дисипативна динаміка частинок (DPD), є ефективними для розв'язку таких задач, оскільки вони спроможні поєднувати молекулярну архітектуру та мезоскопічну організацію матеріалу, залишаючись при цьому обчислювально доступними для великих, гетерогенних та нерівноважних систем. Обидва методи доповнюють один одного. Так, CGMD є ефективнішою з точки зору опису хімічної будови,

полімерних конформацій, локального впакування та орієнтації молекул. DPD добре придатна для опису гідродинаміки, розділення фаз, мобільності на межі розділу, транспорту розчинника на більших масштабах. Їхнє поєднання, разом з атомістичним моделюванням та континуальними теоретичними підходами, забезпечує практичний шлях від молекулярного дизайну до фізичних характеристик матеріалу.

Поєднання полімерної матриці з чутливими до зовнішніх впливів елементами відкриває перспективи розробки нових *стимул-чутливих функціональних матеріалів*, які очікувано залишатимуться в фокусі досліджень. Такі матеріали реагують на температуру, світло, pH, електричні та магнітні поля, склад розчинника або механічне напруження. Завдання дослідників вивчити механізми таких впливів і, по можливості, передбачити, як той чи інший чинник на мікроскопічному рівні поширюється через молекулярну структуру, щоб викликати макроскопічну активацію чи стумульований перенос. До такого типу систем належать: *фоточутливі рідкокристалічні еластомери; магнеточутливі еластомери; термочутливі полімерні гелі; блок-кополімери, здатні до вирівнювання зовнішнім полем; адсорбуючі поверхні у виді функціоналізованих полімерних щіток; активні рідкі кристали; полімерні актуатори та м'які роботизовані матеріали.* При цьому CGMD може виявляти конформаційні та локальні енергетичні механізми, тоді як DPD спроможна фіксувати великі деформації, транспорт розчинника, колективну ре- та самоорганізацію. Стимул-чутливі матеріали класифікуються як важливий клас функціональних матеріалів, але їхня розробка досі лімітується складністю зв'язку між молекулярною реакцією та макроскопічним відгуком. Тому перспективним тут може бути напрямок, що комбінує проведення симуляцій з інверсним проєктуванням та машинним навчанням. Замість розрахунку властивостей для невеликої кількості архітектур, які закладені дослідником зверху, можна використовувати симуляції для побудови сурогатних моделей, що пов'язують молекулярні дескриптори з температурами переходу, оптичною анізотропією, модулем, набуханням або транспортом. Машинне навчання не повинно замінювати фізичне моделювання; а радше прискорити дослідження, тоді як мезоскопічне моделювання забезпечуватиме фізичну інтерпретацію процесів.

Інший важливий напрямок – дослідження *процесів самозбірки полімерів та РК полімерів*, розділення фаз та структура рівноважного стану. Важливими завданнями тут є прогнозування впливу розміру, форми та конформації ланцюжків, а також морфології матеріалів на їхні механічні властивості, відгук на зовнішні збурення, розділення фаз тощо. Важливим моментом є отримання рівноважної морфології залежно від термічної передісторії зразка, випаровування розчинника, зсуву, обмеження та кінетичного захоплення. В

цьому контексті CGMD може досліджувати як хімічна архітектура контролює конформацію ланцюга та персистентну довжину; локальне пакування на межі полімер-полімер та полімер-розчинник; блокову сумісність; водневі зв'язки та специфічну асоціацію; взаємодії наповнювач-полімер; зародження доменів впорядкованої фази. З іншого боку, DPD особливо корисна для моделювання доменів великого розміру, еволюції морфології, спричиненої розчинником, впливу нерівноважної обробки. Вона може враховувати розпад крапель, укрупнення, змочування, поверхневі потоки, мікрофлюїдну збірку тощо. Збереження імпульсу при DPD робить її привабливою для систем, в яких гідродинамічний транспорт бере безпосередню участь у формуванні структури.

РК властивості, такі як: нематичне, холестеричне, стовпцеве або мембранно-асоційоване впорядкування, разом із властивостями полімерів, мають суттєве значення для таких *біологічних систем* як: ДНК, ліпопротеїни низької щільності (LDL), ниткоподібні білки, колаген, пептидні збірки, ліпідні мембрани та цитоскелетні філаменти. Окремо можна виділити розробку нових носіїв для доставки ліків з термо-, магнето- та фото-активацією. Такі задачі поєднують молекулярне розпізнавання, електростатику, гідродинаміку, обмеження та активні сили. Впродовж найближчих років очікується акцент на: впорядкування та компактизацію ДНК та хроматину; самозбірку пептидних та білкових філаментів; рідкокристалічні ліпідні фази в доставці ліків; ремоделювання та злиття мембран; мережі активних філаментів; транспорт через переповнені полімерні біологічні середовища. Слід зазначити, що CGMD може ефективно використовуватись для молекулярного розпізнавання, електростатичної асоціації, водневих зв'язків та локальної збірки, а DPD може описувати більші мембрани, потік розчинника, деформацію везикул, злиття та взаємодію між полімерами та біологічними інтерфейсами. Рідкокристалічні ліпідні фази та зворотні міцели досліджуються також як платформи для доставки ліків, що потребує пов'язання молекулярної організації з транспортом носіїв.

Для вирішення вищезгаданих задач, зокрема засобами мезоскопічного моделювання, необхідно виконати певні методологічні розробки, що стосуються інструментарію досліджень. Важливим моментом є потреба збалансувати структурну точність опису (радіальні функції розподілу, профілі густини, фазова рівновага) від динамічної (коефіцієнти дифузії, в'язкості, часи релаксації). Це, зокрема, важливо для опису полімерів моделями м'яких частинок, де можливі нефізичні перетини ланцюжків та спотворення динаміки заплутаності (entanglements). При застосуванні DPD до РК систем метод повинен бути узагальнений для опису анізотропних взаємодій, електростатики, хіральності, в цілому є потреба у подальшому розвитку

багаточастинких формулювань DPD, залежних від щільності. Подібний прогрес необхідний також для орієнтаційних та хімічно реактивних систем. Валідація моделей повинна включати не лише густину та морфологію, але й міжфазовий натяг, константи пружності, дифузію, релаксацію, в'язкість та реакцію на потік. В цьому напрямку вже розвинуті певні обчислювальні пакети, що підтримують моделювання на атомістичних, мезоскопічних та континуальних масштабах.

(iii) ***Біофізика та біосумісні наноматеріали.*** В Україні сформовано сильні компетенції в коливальній, оптичній, лазерній і флуоресцентній спектроскопії, дослідженні фотодинаміки молекулярних систем, мікроскопії та фізичній характеризації поверхонь. Ці методи мають великий потенціал для свого самостійного розвитку і створюють, водночас, хорошу експериментальну базу для дослідження структурних перетворень ДНК, білків, мембран і клітин, вивчення взаємодії біологічних об'єктів із наноматеріалами, дослідження дії малих доз іонізуючого випромінювання та інших фізичних чинників. Перспективними є кількісний спектральний аналіз, безреагентні біомаркери, біодозиметрія, оптична біосенсорика та поєднання спектроскопії з комп'ютерним аналізом даних.

В Україні отримано також низку цікавих результатів, що стосуються досліджень взаємодії біомолекул і клітин із наноматеріалами, можливостей використання полімерних нановносіїв протипухлинних сполук, шаруватих і двовимірних матеріалів, кальцій-фосфатних систем, нанорозмірного гідроксиапатиту та апатит-біополімерних композитів. Основними задачами у цьому напрямку можуть бути задачі встановлення механізмів адсорбції та зв'язування біомолекул на поверхні, контрольованого вивільнення лікарських речовин, біосумісності й токсичності, а також взаємозв'язку між структурою наноматеріалу та клітинною відповіддю. Прикладні перспективи включають адресну доставку препаратів, подолання хіміорезистентності, регенеративні матеріали, біосенсорні поверхні й функціональні покриття.

Цікавими є перспективи, що спираються на вже наявні результати досліджень іонних каналів, синаптичної передачі, функціональних нейронних мереж, проліферації та апоптозу клітин, механізмів дії протипухлинних препаратів, оксидативного стресу, нейротоксичності й впливу ксенобіотиків. У цьому напрямку інтерес викликають задачі, що націлені на поглиблення кількісного опису зв'язку між молекулярною взаємодією та клітинною функцією, оцінювання впливу біоактивних сполук і наноматеріалів на мембрани, канали й сигнальні шляхи, а також дослідження механізмів клітинної відповіді на фізичні та хімічні чинники. Цей напрям має

безпосереднє значення для біобезпеки, нейротоксикології, онкобіології та біомедичних застосувань.

Основою для подальшого розвитку цього міждисциплінарного напряму можу стати методи та досвід роботи цілої низки наукових груп, які вже мають напрацювання у використанні фізичних підходів до дослідження інших об'єктів фізики м'якої речовини, про що йшлося у попередніх двох пунктах. Використання експериментальних методик, розвинутих у різних наукових групах, у поєднанні з тими можливостями, які відкриває сьогодні комп'ютерне моделювання, дозволяє оптимістично оцінювати перспективи, що відкриває співпраця фахівців з фізики, хімії, біології та матеріалознавства.

Як проміжний висновок до цього розділу можна стверджувати, що в Україні є достатня основа для конкурентного розвитку досліджень із фізики м'якої речовини, що включає висококваліфіковані групи фахівців, експериментальне обладнання та мінімально необхідну інфраструктуру для продовження роботи дослідників у цьому напрямку. Сильними сторонами тут є хороші можливості для використання і розвитку комп'ютерного моделювання із використанням практично всього спектру сучасних методів, досягнення в фізиці складних рідин, рідкокристалічних систем, полімерів і критичних явищ, а також результати, отримані в фізичній та квантовій хімії, матеріалознавстві, ДНК- та білковій біофізиці, розробках нелінійних й квантових моделей, спектроскопії, нейрофізіології, клітинній біології, наномедицині та дослідженнях біоматеріалів. Стратегічною ціллю може стати можливість поєднання цих компетенцій у спільні дослідницькі платформи, які дозволять сконцентрувати зусилля окремих груп на виконання певних завдань, що важливі на державному рівні.

Пропозиції щодо подальшого розвитку напряму «Фізика м'якої речовини»

Комунікація фахівців з окремих напрямків на національному рівні – важливий елемент наукової роботи, який посилює співпрацю в рамках спільноти, стимулює постановки спільних завдань із довгостроковою перспективою, творить майданчик для обговорення останніх досягнень у певній ділянці та відіграє важливу роль у реалізації експертних функцій, відсіваючи псевдонаукові досягнення від дійсно перспективних. Вона може здійснюватися на рівні громадських фахових об'єднань або ж на рівні державних (чи відомчих) структур. Часто задіюються обидві можливості. У цьому сенсі роль наукових рад цілком виправдана і має всі підстави та

потенціал для її посилення. При цьому виникає питання: чи мають наукові ради при відділеннях НАН України належні повноваження і можливості для ефективного виконання своїх функцій? Питання до певної міри риторичне. То ж перша пропозиція: ***Посилення ролі наукових рад через надання їм додаткових повноважень і чіткіше окреслення того функціоналу, який вони повинні виконувати.*** Очевидно, що від рад слід очікувати: якісного виконання експертної функції на усіх рівнях, що особливо важливо в Україні; творення авторитетних майданчиків для комунікації між відповідними фахівцями чи їх групами; обговорення основних трендів у науці та об'єднання зусиль у досягненні амбітних цілей; координація роботи фахівців із напрямку; популяризації науки; розробки пропозицій щодо освітніх програм тощо. Якщо така діяльність здійснюється під патронатом НАН України, то вона мала б передбачати і певну підтримку, зокрема і фінансову, такої роботи. Так, для прикладу, в рамках НАН України могли б виділятися кошти для фінансування певних пошукових проєктів, на основі яких згодом могли б формуватися цільові або ж державні програми.

На такій же основі (однак на вищому рівні) ради могли б активніше залучатися до вироблення стратегічної візії розвитку певної науки (чи галузей наук) у довгостроковій перспективі. При цьому слід зауважити, що ***такого типу документи вимагають тривалого періоду підготовки із залученням найкращих фахівців та проходженням цілої низки обговорень відповідних пропозицій на різних рівнях за участю представників реального сектора виробництва, оскільки мова мала б іти не лише про набір гарних гасел, а про конкретну програму дій із тривалим періодом планування***, у тому числі з відповідними завданнями в сфері освіти, фундаментальної і прикладної науки та виробництва. Для прикладу, саме в такий спосіб подібні питання вирішуються в розвинутих країнах, зокрема в США.

Якщо говорити про стратегії розвитку наукових досліджень в Україні, то чи не основною проблемою тут є те, що в Україні найбільші проблеми пов'язані з відсутністю (фактично руйнацією) зрозумілої та ефективної системи організації науки. Наслідки очевидні – недофінансування (фактично руйнація) науки як такої (десятиліттями в НАН України не в повній мірі покриваються навіть видатки на зарплату, як наслідок – суспільне падіння престижу праці дослідника, відсутність добре окреслених перспектив, зокрема для молоді...) і намагання замінити оплату праці на різного роду тимчасові стимули (стипендії, премії, проєкти...). Як результат зміна пріоритетів в освітній галузі, де щороку скорочується число студентів практично з усіх природничих наук. Ріст плагіату, що відображає недоліки в системі стимулів, впроваджених ніби то задля підтримку науки, зокрема серед державних чиновників, суддів, прокурорів і т.п. І цей список можна продовжувати. Отож,

найнагальнішим завданням щодо майбутнього науки і її стратегічних цілей в Україні є питання про організацію науки в державі. Йдеться не про розбудову симулякрів, які мають показати схожість до того, що бачили в Європі чи США, а про реально працюючу систему з ефективними механізмами та належною фінансовою підтримкою, яка враховує завдання перспективи, якісного кадрового забезпечення та розвинутої наукової інфраструктури в Україні і задля майбутнього держави. Без вирішення цього питання розмови про майбутнє залишаться розмовами. Особливу актуальність це завдання має у період війни та на етапі відбудови держави.

*** * ***

При підготовці аналітичних матеріалів використано пропозиції, що надійшли від голів секцій Наукової ради з проблеми «Фізика м'якої речовини».

Голова ради
академік НАН України І.М. Мриглод