Львів, 26-27 жовтня 2023

# 23-тя Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених

зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини

# Збірка тез

ІФКС · ICMP

Інститут фізики конденсованих систем
НАН України

# XXIII Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини — 2023

**Львів, 26–27 жовтня 2023 р.**

**Інститут фізики конденсованих систем НАН України**

# ПРОГРАМА ТА ТЕЗИ

Львів — 2023

Школа-семінар дає можливість молодим науковцям отримати досвід представлення результатів власних досліджень та познайомитись з іншими актуальними проблемами статистичної фізики у дискусіях за участі провідних спеціалістів.

В програмі:

- Запрошені лекції провідних науковців у галузі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини
- Короткі повідомлення молодих дослідників

За бажанням учасників, їм буде надано можливість додатково проілюструвати свою доповідь з допомогою постера.

Різноманітна культурно-розважальна частина сприятиме особистому знайомству з колегами по фаху і можливості ширших критичних дискусій: окрім наукових лекцій та доповідей учасники Школи-семінару матимуть чудову нагоду відчути дух старовинного міста Лева під час цікавої екскурсії містом та дружньої вечірки, організованих молодими науковцями Інституту.

До участі в роботі Школи-семінару запрошуються молоді науковці віком до 35 років, студенти, аспіранти.

Робоча мова семінару — українська.

## Адреса для контактів

Рада молодих вчених ІФКС НАН України
вул. Свєнціцького, 1
79011 Львів, Україна
Тел: +38 032 2761978
Факс: +38 032 2761158
Електронна пошта: `rmv@icmp.lviv.ua`, `icmp.cys@gmail.com`
Веб-сторінка конкурсу: `http://www.icmp.lviv.ua/konkurs/`
Рада молодих вчених: `http://www.icmp.lviv.ua/icmp/cys/`

**XXIII Всеукраїнська школа-семінар**

**молодих вчених**

**зі статистичної фізики**

**та теорії конденсованої речовини — 2023**

# Програма

**Львів, 26–27 жовтня 2023 р.**

## Четвер, 26 жовтня 2023 р.

## Ранкові засідання 09:50 – 13:10

09:50 – 10:00 Тарас Михайлович Брик
**Вітальне слово від організаторів**
*ІФКС НАН України, Львів*

## Засідання I

Головує І.М. Мриглод

10:00 – 10:15 Ольга Мазур
**Стохастична теорія формування доменної структури в одновісних сегнетоелектриках**
*Technical University of Liberec, Liberec, Chech Republic*

10:15 – 10:30 Петро Сарканич
**Спінові моделі для опису колективного прийняття рішень**
*ІФКС НАН України, Львів*
*$\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College, Europe*

10:30 – 10:45 Оксана Добуш
**Термодинамічні коефіцієнти неперервної системи взаємодіючих частинок**
*ІФКС НАН України, Львів*

10:45 – 11:00 Мар'яна Красницька
**Модель Поттса з невидимими станами: огляд**
*ІФКС НАН України, Львів*
*$\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College, Europe*

11:00 – 11:20 Перерва

## Четвер, 26 жовтня 2023 р.

## Ранкові засідання 09:50 – 13:10

### Засідання II

Головує В.В. Ігнатюк

11:20 – 12:10 Запрошена лекція
Jozef Strecka
**Emergent Ising criticality in Ising-Heisenberg and Heisenberg two-dimensional frustrated spin lattices in a magnetic field**
*Pavol Jozef Šafárik University, Košice, Slovak Republic*

12:10 – 12:25 Тарас Гутак
**Теплоємність спін–$S$ антиферомагнітної моделі Гайзенберга на гратці кагоме**
*ІФКС НАН України, Львів*

12:25 – 12:40 Олеся Крупніцька
**Нелінійний відгук моделі Кітаєва при скінченних температурах**
*Technische Universitat Braunschweig, Braunschweig, Germany*
*ІФКС НАН України, Львів*

12:40 – 12:55 Ольга Багрова
**Топологічні явища в фотонному аналозі графена**
*Institute for Basic Science, Daejeon, Korea*
*ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України, Харків*

12:55 – 13:10 Юліан Гончар
**Модель Ізінґа над верхньою критичною вимірністю**
*ІФКС НАН України, Львів*
*Coventry University, Coventry, UK*
*$\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College, Europe*

13:10 – 14:20 Обідня перерва

# Четвер, 27 жовтня 2023 р.

## Вечірні засідання 14:20 – 15:40

## Засідання III

Головує Т.М. Пацаган

14:20 – 15:10 Запрошена лекція
Тимофій Юрійович Ніколаєнко
**Машинне навчання на базі нейромереж і фізика: у пошуках точок дотику**
*КНУ ім. Т. Шевченка, Київ*

15:10 – 15:25 Ілля-Микола Іленков
**Дослідження динамічних характеристик водневого флюїду в області переходу від молекулярного до атомарного стану**
*ІФКС НАН України, Львів*

15:25 – 15:40 Тарас Демчук
**Особливості пропагаторних та релаксаційних колективних мод розплаву Fe за екстремальних умов**
*ІФКС НАН України, Львів*

## Засідання семінару ОБРІЇ НАУКИ

17:30 – 19:00 Reinhard Folk
**Richard Kirwan – A European Scientist in Times of War**
*Johannes Kepler Universität, Linz, Austria*

## П'ятниця, 27 жовтня 2023 р.

## Ранкові засідання 9:10 – 12:55

### Засідання IV

Головує О.В. Величко

09:10 – 10:00 Запрошена лекція
Андрій Романович Кузьмак
**Еволюція заплутаності ромбічного спінового кластера**
*ЛНУ ім. І. Франка, Львів*

10:00 – 10:15 Ольга Ільїнська
**Теорія роботи детектора мікрохвильових фотонів, заснованого на потоковому кубіті**
*ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України, Харків*
*ІМФ ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ*

10:15 – 10:30 Петро Сапріянчук
**Обчислення узгодженості двокубітних квантових станів на квантовому комп'ютері**
*ЛНУ ім. І. Франка, Львів*

10:30 – 10:45 Тетяна Бубон
**Колективна динаміка молекул води іон-гідратної оболонки подвійної спіралі ДНК**
*ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ*
*International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italy*

10:45 – 11:00 Дмитро Яремчук
**Вплив структури на макроскопічні властивості: щітка ПНІПАМ**
*ІФКС НАН України, Львів*

11:00 – 11:20 Перерва

## П'ятниця, 27 жовтня 2023 р.

## Ранкові засідання 9:10 – 12:55

### Засідання V

Головує Р.В. Романік

11:20 – 12:10 Запрошена лекція
Максим Леонідович Дудка
**Таємні Високі українські школи у Львові (1921-1925)**
*ІФКС НАН України, Львів*

12:10 – 12:25 Остап Калюжний
**Властивості скейлінгу термочутливого полімерного PNIPAM ланцюжка на основі мезоскопічного комп'ютерного моделювання**
*ІФКС НАН України, Львів*

12:25 – 12:40 Роман Скороход
**Розрахунки визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації в сплавах Fe-20Cr-8Ni за різних умов опромінення**
*ІПФ НАН України, Суми*

12:40 – 12:55 Дмитро Шаповал
**Монте-Карло дослідження двосортних реакційно-дифузійних систем з безладом**
*ІФКС НАН України, Львів*
*$\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College, Europe*

12:55 – 14:00 Обідня перерва. Засідання комісії

14:00 – 14:30 Підбиття підсумків. Нагородження переможців.

**XXIII Всеукраїнська школа-семінар**

**молодих вчених**

**зі статистичної фізики**

**та теорії конденсованої речовини — 2023**

# Доповіді школи-семінару

**Львів, 26–27 жовтня 2023 р.**

## Стохастична теорія формування доменної структури в одновісних сегнетоелектриках

О. Мазур

*Технічний університет Ліберця, вул. Галькова, 917, 41617 Ліберець, Чеська Республіка*
*E-mail: o.yu.mazur@gmail.com*

Фізичні властивості сегнетоелектричних матеріалів визначаються станом їхньої доменної структури. Розуміння механізмів формування, зростання й упорядкування доменів відкриває можливості виробництва матеріалів із заданими властивостями.

На основі феноменологічної тореї Ландау-Гінзбурга-Девоншира фазових переходів другого роду було створено стохастичну модель для опису процесу впорядкування доменів в одновісних сегнетоелектриках після швидкого охолодження з параелектричної фази в сегнетоелектричну. Було вивчено вплив полів деполяризації на формування моно- і полідоменних структур. Встановлено біфуркаційну поведінку еволюції середньої поляризації та її диперсії. Визначено залежні від температури величини електричного поля, що розділяють області моно- і полідоменного впорядкування і можуть бути охарактеризовані, як коерцитивні поля.

Було отримано аналітичні вирази для кореляційної довжини, поздовжньої та поперечної кореляційної функції, які показали хорошу згоду з відомими експериментальними даними. Було отримано повний набір аналітичних виразів для залежних від часу коефіцієнтів двоточкової кореляційної функції між усіма випадковими змінними. Вони становлять особливий практичний інтерес під час аналізу нелінійних явищ із просторовою дисперсією, зокрема, під час генерації другої гармоніки оптичного випромінювання та розсіювання.

**Спінові моделі для опису колективного прийняття рішень**

П. Сарканич[a,b], Ю. Головач[a,b,e,f], М. Красницька[a,b], П. Романчук[c,d], Ю. Севінчан[c,d]

[a] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
[b] *$\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems, Leipzig-Lorraine-Lviv-Coventry, Europe*
[c] *Institute for Theoretical Biology, Department of Biology, Humboldt Universität zu Berlin, 10099 Berlin, Germany*
[d] *Research Cluster of Excellence "Science of Intelligence 10587 Berlin, Germany*
[e] *Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry, CV1 5FB, United Kingdom*
[f] *Complexity Science Hub Vienna, 1080 Vienna, Austria*

У нещодавній роботі [1] було запропоновано феноменологічну модель колективного прийняття рішень, яка бере до уваги індивідуальні упередження кожного взаємодіючого агента. Ми запропонували [2] дві мікроскопічні спінові моделі на основі моделі Ізінга, які вводять упередження у різний спосіб, і знайшли їх точний розв'язок на повному графі. В першій моделі упередження входить множником у доданок, що відповідає за взаємодію у гамільтоніані. Ця модель є еквівалентною до моделі у зовнішньому магнітному полі. І, як наслідок, у ній не спостерігаються фазові переходи. Друга модель є моделлю із локальним самоузгодженим полем і має значно башатшу фазову діаграму. Ми детальніше зупинимося на трьох часткових випадках:

- конкуренція двох співмірних груп;
- формування консенсусу в популяції із сильною меншістю і слабкою більшістю;
- дві протиборчі групи із стійким упередженням.

[1] A.T. Hartnett, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 038701 (2016).
[2] P. Sarkanych, *et al.*, *Physical Biology* **20**(4), 045005 (2023).

## Термодинамічні коефіцієнти неперервної системи взаємодіючих частинок

О.А. Добуш, М.П. Козловський

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,*
*вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
*E-mail: oksana.dobush8@gmail.com*

У цій роботі ми продовжуємо досліджувати властивості моделі неперервної системи частинок із парною взаємодією типу Кюрі-Вейса, яка містить відштовхувальну і притягальну частини. Ця модель слугує мікроскопічним аналогом наближення середнього поля для неперервних систем. Крім того, вона має точний розв'язок в формалізмі великого канонічного ансамблю [1], а також їй притаманна послідовність фазових переходів першого роду при температурах нижче критичної $T_c$. На основі точного рівняння стану досліджуваної системи ми розрахували набір її термодинамічних коефіцієнтів (зокрема, ізотермічну стисливість, теплове розширення, термічний коефіцієнт тиску, ізобарну та ізохорну теплоємності тощо) та дослідили їхню поведінку в широкій області густин і температур нижче критичної точки.

[1] Kozlovskii M.P., Dobush O.A., *J. Mol. Liq.* **353**, 118843 (2022).

**Модель Поттса з невидимими станами: огляд**

М. Красницька[a,b], П. Сарканич[a,b], Б. Берш[a,b,c], Ю. Головач[a,b,d,e], Р. Кенна[b,d]

[a] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
[b] *$\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems, Leipzig-Lorraine-Lviv-Coventry, Europe*
[c] *Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques, Université de Lorraine - CNRS, UMR 70196 Nancy, France*
[d] *Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry, CV1 5FB, United Kingdom*
[e] *Complexity Science Hub Vienna, 1080 Vienna, Austria*

Модель Поттса з невидимими станами була запропонована для пояснення розбіжностей між теоретичними прогнозами та експериментальними спостереженнями фазових переходів у системах, де симетрія $Z_q$ спонтанно порушується. Вона відрізняється від звичайної $q$-станової моделі Поттса тим, що кожен спін, окрім звичайних $q$ видимих станів, також може перебувати в будь-якому з $r$ так званих невидимих станів. Спіни в невидимому стані не взаємодіють зі своїми сусідами, але вони дають вклад в ентропію системи. Як наслідок, збільшення $r$ може призвести до зміни фазового переходу від другого до першого роду. Невидимі стани, як вони сформульовані в статистичній фізиці, мають свої аналоги в інших ділянках науки. У теорії ігор аналогією невидимих станів є «нейтральні стратегії», що забезпечують нульові виграші незалежно від ходу гравця. Іншим прикладом є «невидимі флуктуації», які були введені для вирішення задач оптимізації.
Більш детальну інформацію можна знайти в нашому огляді цієї моделі [2].

[1] R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima., *Prog. Theor. Phys.* **124**, 381 (2010).
[2] M. Krasnytska, P. Sarkanych, B. Berche, Yu. Holovatch, R. Kenna., *Eur. Journ. Phys. ST* **232**, 1681-1691 (2023).

## Теплоємність спін–$S$ антиферомагнітної моделі Гайзенберга на гратці кагоме

Т. Гутак

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,*
*вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*

Антиферомагнітна модель Гайзенберга на гратці кагоме вже протягом більш ніж трьох десятиліть є теоретичним майданчиком для дослідження геометричної фрустрації [1]. Попри значний прогрес в розумінні моделі, деякі питання досі остаточно не вирішені. Однією з таких проблем є низькотемпературна особливість теплоємності моделі із спіном $S = 1/2$. Результати точної діагоналізації для скінченних систем свідчать про наявність додаткового низькотемпературного плеча в профілі теплоємності [2]. Однак поведінка теплоємності із ростом значення спіну $S$ не досліджена.

Ми розглянемо спін–$S$ антиферомагнітну модель Гайзенберга на гратці кагоме використовуючи високотемпературні розвинення 11-го порядку [3]. Теплоємність на всьому температурному інтервалі обчислимо методом ентропії [4] (інтерполяція між високими і низькими температурами із використанням правил сум для енергії і ентропії). Для покращення інтерполяційної процедури використаємо відомі значення енергії основного стану [5].

Робота виконана разом із Олегом Держком (ІФКС), Тарасом Крохмальським (ІФКС) і Йоганнесом Ріхтером (Університет Магдебурга).

[1] A. M. Läuchli, J. Sudan, and R. Moessner, *Phys. Rev. B* **100**, 155142 (2019).
[2] J. Schnack, J. Schulenburg, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **98**, 094423 (2018).
[3] A. Lohmann, H.-J. Schmidt, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **89**, 014415 (2014).
[4] B. Bernu and C. Lhuillier, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 057201 (2015).
[5] O. Götze, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop, P. H. Y. Li, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **84**, 224428 (2011).

**Нелінійний відгук моделі Кітаєва при скінченних температурах**

О. Крупніцька[a,b], В. Бреніг[a]

[a] *Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Braunschweig, 38106 Braunschweig, Germany,*
[b] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
*E-mail: olesia.krupnitska@tu-braunschweig.de*

Нелінійна спектроскопія є одним з важливих методів вивчення елементарних збуджень квантових магнетиків [1]. Мотивуючись результатами нещодавньої роботи [2], в даному дослідженні вивчається нелінійний відгук шестикутної моделі Кітаєва [2], зумовлений зовнішніми електричними полями. Основним станом цієї фрустрованої моделі є квантова спінова рідина, тоді як елементарні дробові збудження складаються з рухомих ферміонів Майорана і $\mathbb{Z}_2$ статичних візонів. Розраховано функції відгуку другого порядку (сприйнятливості) при скінченних температурах з допомогою методу рівняння руху. Показано, що нелінійний відгук при скінченних температурах дозволяє досліджувати характерні особливості цих обох типів квазічастинок [4].

[1] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics* (3rd ed.), Orlando: Academic Press (2008).
[2] M. Kanega, T. N. Ikeda, and M. Sato, *Phys. Rev. Research* **3**, L032024 (2021).
[3] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **321**, 2 (2006).
[4] O. Krupnitska and W. Brenig, *Phys. Rev. B* **108**, 075120 (2023).

**Топологічні явища в фотонному аналозі графена**

О.М. Багрова [a,b], С.В. Коняхін [a]

[a] *Центр теоретичної фізики складних систем, Інститут фундаментальних наук, Експо-ро 55, 34126 Теджон, Республіка Корея*
*E-mail: olha@ibs.re.kr*

[b] *Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України, пр-т Науки, 47, 61103 Харків, Україна*

Топологічна фотоніка знаходиться в авангарді тем сучасної фізики. Більш того, ексітон-поляритони (поляритони) займають особливе місце серед фотонних платформ завдяки наявності внутрішньої нелінійності та можливості керування профілем хвильової функції. З іншого боку, особливості зонної структури решіток типу графена дозволяють реалізувати їх у галузі фотоніки. Так, існують численні дослідження топологічних і транспортних властивостей штучно створених стільникових решіток.

В даній роботі ми розглядаємо поляритонний аналог графену за наявності ефективного потенціалу. Для того, щоб дослідити часову еволюцію хвильового пакета, ми виконали чисельне моделювання з використанням рівняння Ґросса-Пітаєвського в лінійному режимі, а також в рамках моделі сильного зв'язку. Отримано та проаналізовано оптичний аналог електронних зміїних станів для даної системи.

**Модель Ізінґа над верхньою критичною вимірністю**

Ю. Гончар

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,*
*вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
*Центр плинних і складних систем, Університет Ковентрі, Ковентрі, CV1 5FB, Великобританія*
*Співпраця* $\mathbb{L}^4$ *і Коледж докторантів "Статистична фізика складних систем", Ляйпціґ-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа*
*E-mail: julkohon@icmp.lviv.ua*

У термодинамічній границі критичний скейлінґ для високих вимірностей системи описується теорією середнього поля. Перехід до критичних показників Ландау відбувається над так званою верхньою критичною вимірністю $d_c$, яка визначається з критерію Ґінзбурґа. Для моделі Ізінґа верхня критична вимірність $d_c = 4$. Втім, для систем скінченного розміру спостерігається інша картина. Нещодавні роботи показують, що довжина кореляції не обмежується фізичним розміром системи, як довгий час вважалося раніше. Замість цього спостерігаються два режими скейлінґу - при критичних та псевдокритичних температурах. Ми демонструємо, що обидва режими, так званий G- та Q-скейлінґ, проявляються для систем з вільними граничними умовами і порівнюємо ці результати з попередніми роботами для ґраток з періодичними граничними умовами. Ми використовуємо числові симуляції моделі Ізінґа при $d = 5$, щоб проаналізувати скінченновимірний скелінґ намагніченості, сприйнятливості, магнітних мод Фур'є-перетворень намагнічення та нулів статистичної суми. Хоча деякі з функцій відгуку приховують подвійний скінченовимірний скейлінґ, точність, забезпечена аналізом нулів Лі-Янга, дозволяє його побачити явно. Зокрема, скінченновимірний скейлінґ перших нулів у псевдокритичній точці підтверджує нещодавні прогнози, що виникають з кореляцій, які перевищують розмір системи.

**Дослідження динамічних характеристик водневого флюїду в області переходу від молекулярного до атомарного стану**

І.-М. Іленков[a], Т.М. Брик[b,a]
[a] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
*E-mail: imai@icmp.lviv.ua*
[b] *Національний університет «Львівська політехніка», вул. Степана Бандери, 12, 79013 Львів, Україна*
*E-mail: bryk@icmp.lviv.ua*

Відомо[1], що флюїд водню за низького тиску перебуває у молекулярному стані. Підвищення тиску у системі спричиняє дисоціацію молекул $H_2$ на окремі атоми. За посереднього тиску (~ $10^5$ бар) та температури (~ 2500 K) такий процес не є незворотнім – у системі постійно перебуває деяка кількість окремих атомів водню та молекул $H_2$, і кожен атом може перейти з одного стану в інший. Подальше збільшення тиску призводить до повної дисоціації системи, що веде до її металізації. Такий ефект можна спостерігати в моделюванні методом ab initio молекулярної динаміки (AIMD). Дослідження динамічних властивостей флюїдів з наявною дисоціацією/асоціацією є фактично новим напрямком, що потребує комплексного підходу як з точки зору теорії, так і першопринципного моделювання.

Ми проводили дослідження системи, що складалась з 500-та молекул $H_2$ за температури 2500 K та діапазону тисків від 2 до 100 ГПа. Моделювання виконувались за допомогою методу AIMD з використанням програмного пакету VASP. Обчислення часових кореляційних функцій були проведені на основі одержаних траєкторій частинок, а розподіл парціальних внесків був здійснений за допомогою раніше запропонованого неперервного ймовірнісного розподілу за відстанню у вигляді гіперболічного тангенсу. В результаті, внески від молекулярної та атомарної компонент були проаналізовані з використанням дійсного Фур'є перетворення, що дозволило отримати динамічні структурні фактори та спектральні розподіли кореляційних функцій потік-потік. З отриманих даних ми були в змозі побудувати дисперсійні криві для атомів обох сортів.

[1] J. M. McMahon, M. A. Morales, C. Pierleoni, D. M. Ceperley, The properties of hydrogen and helium under extreme conditions, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1607 (2012).

## Особливості пропагаторних та релаксаційних колективних мод розплаву Fe за екстремальних умов

Т. Демчук[a], Т.М. Брик[a,b]

[a] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
[b] *Національний університет «Львівська політехніка», вул. Степана Бандери, 12, 79013 Львів, Україна*

Дана робота присвячена дослідженню внесків флуктуацій гідродинамічних та не-гідродинамічних змінних до пропагаторних та релаксаційних колективних мод розплаву Fe за умов високих тисків та температур. Для цього, було проведено комп'ютерне моделювання системи 16000 атомів Fe в рамках методу молекулярної динаміки, реалізованому у пакеті прикладних програм LAMMPS. Міжчастинкова парна взаємодія описувалась потенціалом EAM-типу, значення параметрів для якого взяті з [1]. На основі даних, отриманих з комп'ютерного експерименту, було проведено теоретичний аналіз колективної динаміки системи методом узагальнених колективних мод на основі п'ятизмінного термов'язкопружного базисного набору динамічних змінних. Для оцінки внесків флуктуацій гідродинамічних та не-гідро-динамічних змінних до пропагаторних та релаксаційних колективних мод було проведено аналіз значень компонент власних векторів гідродинамічної матриці. Для цього, було отримано матрицю лінійної трансформації для перетворення базисного набору динамічних змінних у ортогоналізований базисний набір динамічних змінних. На основі нового базису було отримано нову гідродинамічну матрицю та розраховано її власні вектори. Аналіз залежності значень компонентів таких векторів від хвильового числа показав, що у гідродинамічній границі поширення поздовжнього звуку у системі відбувається в основному за рахунок флуктуацій густини та масового потоку. При цьому, зі збільшенням значення хвильового числа внесок від флуктуацій густини спадає, натомість, внесок від флуктуацій тензора напружень швидко збільшується, набуваючи максимуму в околі значення хвильового числа головного максимуму структурного фактора.

[1] Mendelev et al. Philosophical Magazine **83**, 35 (2003).

## Теорія роботи детектора мікрохвильових фотонів, заснованого на потоковому кубіті

О.О. Ільїнська[a,b], С.М. Шевченко[a]

[a] *Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Вєркіна НАН України, просп. Науки, 47, 61103 Харків, Україна,*
*E-mail: ilinskaya@ilt.kharkov.ua, sshevchenko@ilt.kharkov.ua*
[b] *Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна*

Ми теоретично досліджуємо роботу детектора мікрохвильових фотонів на основі потокового кубіта. Дану задачу можна розглядати як задачу про квазічастинку у двох'ямному потенціалі, яка має декілька рівнів енергії. За допомогою чисельних розрахунків (з використанням квазікласичного наближення, коли електромагнітне поле знаходиться в когерентному стані) ми отримуємо динаміку заселення рівнів системи, яка відповідає трьом етапам циклу роботи детектора – захопленню, зчитуванню, перезарядці. На етапі захоплення на систему діє зовнішній мікрохвильовий сигнал, який є резонансним з локалізованими в різних ямах робочими рівнями детектора і викликає осциляції Рабі між ними. Ці осциляції затухають завдяки наявності дисипації (ми беремо до уваги лише енергетичну релаксацію, дефазування не впливає на якісну картину динаміки), а квазічастинка поступово переходить на найнижчий енергетичний рівень. Перехід квазічастинки з однієї ями до іншої викликає зміну напрямку струму в кільці (зчитування). Перезарядка здійснюється за допомогою лінійної зміни зовнішнього магнітного потоку, при цьому відбувається викривлення потенціалу і перехід квазічастинки з найнижчого рівня на один з робочих. Перезарядку ми описуємо, розв'язуючи трирівневу задачу Ландау-Зенера-Штюкельберга-Майорани, і отримуємо залежність заселення рівнів від зовнішнього магнітного потоку.

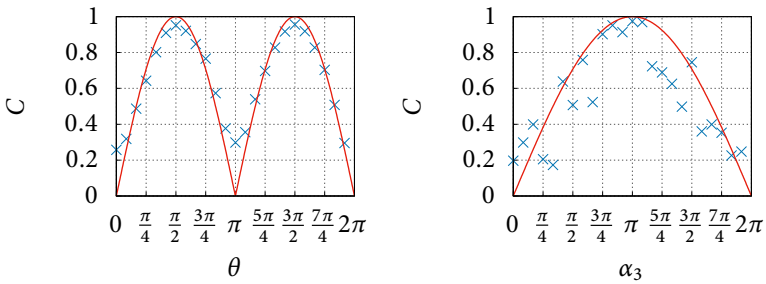
Дане дослідження спонсорується грантом NATO Science for Peace and Security Multi-Year Project G5796 і грантом НАН України для молодих учених "Мезоскопічні системи для квантової інтерферометрії та детектування поодиноких фотонів" (номер державної реєстрації 0123U103073).

## Обчислення узгодженості двокубітних квантових станів на квантовому комп'ютері

П.В. Сапріянчук, Х.П. Гнатенко

*Львівський національний університет ім. І. Франка,*
*кафедра теоретичної фізики ім. професора Івана Вакарчука,*
*вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна*
*E-mail: petro.sapriianchuk30@gmail.com*

Досліджується узгодженість двокубітних квантових станів за допомогою теоретичних розрахунків та квантового програмування на комп'ютері IBM Lima [1]. Вивчається залежність заплутаності таких станів від їх параметрів. З цією метою знаходяться середні значення спінових операторів на квантовому комп'ютері. Результати квантових обчислень узгоджуються з теоретичними (див. Рис. 1).




(а) (б)

Рис. 1: Результати квантових обчислень узгодженості стану $|\chi(\theta)\rangle = \cos(\theta/2)|01\rangle + \sin(\theta/2)|10\rangle$ (а), та стану $|\psi(\alpha_3)\rangle = \big(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + e^{i\alpha_3}|11\rangle\big)/2$ (б) на квантовому комп'ютері IBM Lima (позначено хрестиками) та теоретичні (неперервна лінія).

[1] IBM Quantum Computing.

## Колективна динаміка молекул води іон-гідратної оболонки подвійної спіралі ДНК

Тетяна Бубон[a,c], Олексій Здоревський[b], Сергій Перепелиця[a]

[a] *Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, вул. Метрологічна, 14-б, 03143 Київ, Україна*
[b] *University of Helsinki,Gustaf Hällströmin katu 2, Helsinki, FI-00014, Finland*
[c] *Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Strada Costiera, 11, 34151 Trieste, Italy*

Катіони металів та молекули води утворюють іон-гідратну оболонку навколо ДНК, відіграючи важливу роль у структурній організації та біологічних процесах подвійної спіралі. Так, детальне вивчення структури та динаміки іон-гідратної оболонки є необхідним для розуміння фізичних механізмів біологічного функціонування ДНК. В даній роботі, для вивчення колективних коливань молекул води іон-гідратної оболонки був використаний теоретичний підхід та метод класичної молекулярної динаміки (МД). Ми окремо розглянули молекули води, що локалізовані у різних областях подвійної спіралі ДНК: фосфатні групи, малий та великий жолоби. Наша увага була зосереджена на аналізі низькочастотного регіону коливального спектра (<300 см$^{-1}$), де спостерігаються міжмолекулярні коливання молекул води, а також конформаційні коливання ДНК.

Результати розрахунків на основі запропонованого теоретичного підходу [1] показали, що частота трансляційних коливань молекул води в малому жолобі ДНК знаходиться в діапазоні від 160 до 210 см$^{-1}$ в залежності від типу нуклеотиду. Подальше МД моделювання [2] виявило значні відмінності у коливальній динаміці молекул води гідратної оболонки ДНК у порівняні з об'ємом. Аналізуючи коливальну густину станів атомів молекул води навколо ДНК, ми виділили шість мод коливань. Результати показали, що частота коливань молекул води біля поверхні ДНК зсувається на ~15–20 см$^{-1}$ у високочастотну область спектра, з найбільшим частотним зсувом у малому жолобі. Крім того, взаємодія молекул води з атомами ДНК призводить до затухання моди симетричних розтягнень водневого зв'язку у розрахованих нами спектрах.

[1] T.L. Bubon, S.M. Perepelytsya, *Eur Phys J E* **44(6)**, 84 (2021);
[2] T. Bubon, O. Zdorevskyi, S. Perepelytsya, *Eur Biophys J* **52(1)**, 69 (2023).

**Вплив структури на макроскопічні властивості: щітка ПНІПАМ**

Д. Яремчук, О. Калюжний, Я.М. Ільницький

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,*
*вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
*E-mail: yaremchuk@icmp.lviv.ua, ostapk@icmp.lviv.ua, iln@icmp.lviv.ua*

Термочутливі щітки на основі молекул poly(N-isopropylacrylamide) або (ПНІПАМ) належать до типу матеріалів, що здатні реагувати у корисний спосіб на зміни зовнішніх умов зміною своїх властивостей. Перехід щітки від стану клубка при нижчій температурі до сколапсованого при вищій є наслідком наявності нижньої критичної температури розчинності (НКТР) для молекул ПНІПАМ у воді. Така поведінка щіток ПНІПАМ дозволяє використовувати їх як субстрати із температурно контрольованою адгезією для вирощування різних біологічних культур: бактерій, водоростей, живих тканин.

Одним напрямком дослідження таких систем є виявлення механізму появи НКТР та ролі перегрупування водневих зв'язків у системі ПНІПАМ-вода, для чого широко застосовуються атомістичні симуляції. Менш розробленим напрямком є виявлення мезоскопічних механізмів, що можуть впливати на властивості матеріалів із ПНІПАМ, де корисними є огрублені методи симуляцій. Зокрема, з використанням методу дисипативної динаміки, ми виявили наявність діапазону густини пришпилення щітки, для якого спостерігається максимальні зміни висоти щітки та характеристик форми індивідуальних ланцюжків.

Напрямком який планується досліджувати у майбутньому є мезоскопічні дослідження субстратів де окрім щітки ПНІПАМ є інша компонента, наприклад тверді структури різної форми.

**Властивості скейлінгу термочутливого полімерного PNIPAM ланцюжка на основі мезоскопічного комп'ютерного моделювання**

Д. Яремчук, О. Калюжний, Я.М. Ільницький

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,*
*вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
*E-mail: yaremchuk@icmp.lviv.ua, ostapk@icmp.lviv.ua, iln@icmp.lviv.ua*

Досліджено термочутливий полі(N-ізопропілакриламіду) (PNIPAM) ланцюжок [1]. PNIPAM полімер це матеріал, який має численні технологічні та біомедичні застосування. Розглянуто два випадки, а саме пришпиленого ланцюжка до функціональної поверхні та вільного ланцюжка. Для аналізу цих випадків ми застосовуємо комп'ютерне моделювання з використанням методу дисипативної динаміки. Використана тут модель базується на попередній роботі [2] яка імітує основну особливість полі (N-ізопропілакриламіду), а саме, швидка зміна його гідрофільності при нижній критичній температурі розчину (LCST). Ми зосередились на дослідженні скейлінгових властивостей PNIPAM полімеру у режимі безмежного розведення. Обговорюємо властивості скейлінгу радіуса гірації, відстані початок-кінць та різних функцій розподілу при температурі яка нижча та вища LCST.

[1] D. Yaremchuk, O. Kalyuzhnyi, J. Ilnytskyi, Modelling thermoresponsive polymer brush by mesoscale computer simulations, Condensed Matter Physics Vol. **26**, No. 3, 33302 (2023)
[2] Soto-Figueroa et al., Soft Matter, **8**, 1871-1877 (2012)

## Розрахунки визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації в сплавах Fe-20Cr-8Ni за різних умов опромінення

Р.В. Скороход,О.В. Коропов

*Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, 40000 Суми, Україна*
*E-mail: r.skorokhodqq@gmail.com*

Явище радіаційно-індукованої сегрегації (РІС) полягає в зміні локального складу сплаву під дією опромінення. Це призводить до збіднення або збагачення головних, домішкових та легуючих компонентів сплаву поблизу стоків точкових дефектів (поверхонь зразку, пор, дислокаційних петель, міжзеренних і міжфазних меж, тощо) [1].

Дана робота присвячена моделюванню РІС в концентрованих металевих сплавах Fe-20Cr-8Ni від початку опромінення до виходу на стаціонарний режим РІС в широкому діапазоні швидкостей продукування точкових дефектів та температур. Для числових розрахунків РІС використовувалася модель, яка базується на першому та другому законах Фіка з врахуванням оберненого ефекту Кіркендала [1-3]. В роботі здійснено розрахунки та аналіз визначальних кількісних характеристик РІС, до яких ми відносимо: концентраційні профілі елементів сплаву і точкових дефектів, поверхневу концентрацію елементів, величину поверхневого збагачення (збіднення) елементів, повну ширину концентраційного профілю елементів на рівні половини максимального збагачення (збіднення), сегрегаційну площу елементів та дискримінант РІС елементів в стаціонарному режимі.

[1] G. S. Was, Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys (2nd ed.), New York: Springer (2017).
[2] Р. Скороход, О. Бугай, В. Білик, В. Денисенко та О. Коропов, "Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в бінарних сплавах", *East Eur. J. Phys.* т. **5**, № 1, с. 61-69 (2018).
[3] R. V. Skorokhod and O. V. Koropov, "Modelling of Radiation-Induced Segregation in Fe–9 at.% Cr Alloy with the Alloy Dislocation Subsystem Considered", *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* vol. **44**, no. 6, pp. 691–711 (2022) (in Ukrainian).

## Монте-Карло дослідження двосортних реакційно-дифузійних систем з безладом

Д. Шаповал

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,*
*вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*
*Співпраця* $\mathbb{L}^4$*, Докторський коледж із статистичної фізики складних систем, Ляйпціґ-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа*

Розглянуто задачу про виживання частинок-мішеней $B$ в неоднорідному середовищі з рухомими частинками-пастками $A$, що можуть коагулювати або взаємно анігілюють $[A + A \to (\oslash, A)$ та $A + B \to A]$ [1, 2, 3]. У випадку простих реакційно-дифузійних процесів неоднорідне середовище моделюється безладом типу Сіная, потенціальним полем чи далекосяжним скорельованими потенціальним і соленоїдальним полями [4]. В цих дослідженнях показано, що поведінка густини частинок на великих часах залежить як від наявності самого безладу в системі, так і від його величини. Тому метою нашого дослідження є проаналізувати методами Монте-Карло ймовірність виживання частинок-мішеней $B$ у неоднорідному середовищі, що моделюється двовимірною $d = 2$ ґраткою з точковиими випадковими дефектами (заморожений структурний безлад при якому частина вузлів ґратки є заборонені для відвідування частинок та є зафіксовані). Зокрема показано, що концентрація частинок-мішеней $B$ спадає повільніше у присутності дефектів у порівнянні з "чистою"двовимірною ґраткою.

[1] U. C. Täuber, M. Howard and B. P. Vollmayr-Lee, *J. Phys. A* **38**, R79 (2005).
[2] B. Vollmayr-Lee, J. Hanson, R. S. McIsaac and J. D. Hellerick, *J. Phys. A: Math. Theor.* **51**, 034002 (2018).
[3] D. Shapoval, V. Blavatska and M. Dudka, *J. Phys. A: Math. Theor.* **55**, 455002 (2022).
[4] V. Kravtsov, I. V. Lerner, and V. I. Yudson, *Phys. A: Math. Gen.* **18**, L703 (1985).

# Авторський покажчик

Багрова О.М., 19
Берш Б., 16
Бреніг В., 18
Брик Т.М., 21, 22
Бубон Тетяна, 25
Гнатенко Х.П., 24
Головач Ю., 14, 16
Гончар Ю., 20
Гутак Т., 17
Демчук Т., 22
Добуш О.А., 15
Здоревський Олексій, 25
Іленков І.-М., 21
Ільїнська О.О., 23
Ільницький Я.М., 26, 27
Калюжний О., 26, 27
Кенна Р., 16
Коняхін С.В., 19
Коропов О.В., 28
Козловський М.П., 15
Красницька М., 14, 16
Крупніцька О., 18
Мазур О., 13
Перепелиця Сергій, 25
Романчук П., 14
Сапріянчук П.В., 24
Сарканич П., 14, 16
Севінчан Ю., 14
Скороход Р.В., 28
Шаповал Д., 29
Шевченко С.М., 23
Яремчук Д., 26, 27

XXIII Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2023

Львів, 26–27 жовтня 2023 р.

**Збірка тез**

© Інститут фізики конденсованих систем НАН України
Львів, 2023

Комп'ютерне макетування: Андрій Швайка

Укладання: Данило Добушовський

Графічний дизайн: Петро Сарканич

**Підтримка:**

Young Minds

УФТ