Національна академія наук України
Відділення фізики і астрономії

Наукова рада з проблеми “Фізика м’якої речовини”

Короткий підсумок діяльності протягом 2016–2020 років

Львів-Київ-2021

Наукова рада з проблеми «Фізика м'якої речовини». Короткий підсумок діяльності протягом 2016–2020 років. – Львів-Київ, 2021. – 193 с.

У книзі представлені вибрані результати робіт із фізики м'якої речовини, які проводилися протягом 2016–2020 років у наукових й освітніх установах України і координувалися діяльністю Наукової ради з проблеми «Фізика м'якої речовини» при Відділенні фізики і асторономіі НАН України, а також вибрані довідкові матеріали.

Редакційна колегія

Юхновський І.Р. (відповідальний редактор), Брик Т.М., Булавін Л.А., Головко М.Ф., Загородній А.Г., Іванків О.Л., Лев Б.І., Мриглод І.М., Петров Е.Г., Томчук П.М., Трохимчук А.Д.

В основі зображення на обкладинці – малюнок, отриманий шляхом комп'ютерного моделювання Тарасом Пацаганом (ІФКС НАН України)

© Інститут фізики конденсованих систем НАН України, 2021

Зміст

Передмова 5
Персональний склад і структура наукової ради 8
Склад секції статистичної фізики 9
Склад секції фізики рідкого стану 10
Склад секції рідких кристалів 11
Склад секції макромолекулярних та біологічних систем 12
Склад секції комп'ютерного моделювання м'якої речовини 13
Список установ 14
Короткі наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини 15
А.Г. Загородній, О.Ю. Слюсаренко, Ю.В. Слюсаренко. Кінетика низькотемпературного газу водневоподібних атомів у зовнішньому електромагнітному полі 15
О.В. Пацаган, Т.М. Пацаган, М.Ф. Головко. Фазова поведінка іонних рідин у невпорядкованих пористих середовищах 22
Б.І. Лев. Статистична фізика і геометрія самоґравітаційних систем 31
А. Трохимчук, Р. Мельник. Розвиток концепції системи відліку в теорії простих плинів 37
Л.А. Булавін, Д.В. Соловйов. Динаміка ліпідних мембран та фазові переходи в них 46
С.І. Мудрий, І.І. Штаблавий. Мікронеоднорідність структури металевих розплавів 55
А. Баумкетнер. Теоретичні підходи до моделювання колективних властивостей білків 71
С.П. Бєлих, В.Ю. Решетняк. Рідкокристалічні лінзи з керованою оптичною силою 84
П.П. Костробій, І.І. Григорчак, Б.М. Маркович, О.В. Візнович, М.В. Токарчук. Моделювання субдифузійного імпедансу у мультишарових наноструктурах 92
Основні результати 99
Анотації вибраних результатів наукових досліджень 135
Статистична фізика 135
Фізика рідкого стану 145
Рідкі кристали 150
Макромолекулярні та біологічні системи 157
Комп'ютерне моделювання м'якої речовини 163
Довідкові матеріали 166
Монографії 166
Підручники 166
Тематичні збірники 167
Розділи в монографіях 168

Докторські дисертації 169
Координаційна діяльність 170
Відзнаки: премії, нагороди 175
Участь в організації конференцій 179
Контакти 182

Передмова

У цій книзі **Наукова рада з проблеми «Фізика м'якої речовини». Короткий підсумок діяльності протягом 2016–2020 років** представлено результати досліджень із фізики м'якої речовини, що проводилися в наукових і освітніх закладах України і координувалися Науковою радою протягом останніх п'яти років. Це вже четверте видання такого типу. Перші три з них були опубліковані, відповідно, у 2006, 2011 і 2016 роках.

Поняття м'якої речовини, що виникло близько 50 років тому в групі французького вченого П'єра-Жіля де Жена, лауреата Нобелівської премії, іноземного члена НАН України, на даний час займає вагоме місце в фізиці конденсованої речовини. Цим терміном натепер окреслюють широке коло об'єктів, що традиційно відносились раніше переважно до сфери хімічних і біологічних наук. Це, насамперед, об'єкти фізики рідкого стану – прості та молекулярні рідини і розчини, розчини і розплави електролітів, металічні та метало-сольові розплави тощо. У більш вузькому значенні поняття м'якої речовини іноді ототожнюють із складними рідинами, характерною ознакою яких вважається наявність частинок або структур мезоскопічних розмірів. Це, насамперед, полімери, поліелектроліти, колоїдні та міцелярні системи, рідкі кристали, мікроемульсії, макромолекулярні та біологічні рідини тощо. Однак термін «м'яка речовина» є значно ширшим за поняття «складні рідини» і включає також форми м'якої речовини, які не є рідинами. Це, насамперед, гелі, мембрани, різноманітні біологічні об'єкти, аморфні, сипучі, гранульовані та склоподібні матеріали.

М'яка речовина охоплює різноманітні фізичні стани конденсованої речовини, що легко деформуються тепловими флуктуаціями або механічними напруженнями. Незважаючи на різні форми матеріалів м'якої речовини, більшість її властивостей мають спільні характерні особливості. Це, насамперед, просторова і часова багатомасштабність, що характеризується співіснуванням процесів із широким спектром часових і просторових масштабів. Із багатомасштабністю пов'язана складність м'якої речовини, що проявляється, перш за все, у відсутності простих і наочних уявлень про її структуру, яка має ймовірнісний характер. Тому для розуміння та інтерпретації її властивостей виникає потреба у використанні методів статистичної фізики. На мікроскопічному рівні м'яка речовина характеризується ближнім порядком, обумовленим розмірами молекул. Проте у багатьох об'єктах, починаючи зі складних рідин, м'яка речовина самоасоціюється в різноманітні асоціати та мезоскопічні структури, взаємодія між якими визначає властивості м'якої речовини. В цьому і полягає основна особливість мікроскопічної теорії м'якої речовини, яка повинна на основі атомно-молекулярних уявлень передбачити, як утворення таких

мезоскопічних структур та взаємодію між ними, так і спрогнозувати макроскопічні властивості речовини.

Другою характерною рисою м'якої речовини є її надзвичайна чутливість до слабких зовнішніх чинників, обумовлена нерегулярністю її структури. Завдяки цьому м'яка речовина володіє достатньою гнучкістю, що власне і приводить до її м'якості і в загальному випадку проявляється в наявності достатньо великої функції відгуку та в багаточисельних прикладах порушення симетрії. Загалом м'якість м'якої речовини зумовлює широку багатогранність та унікальність її властивостей, що переважно не спостерігаються у твердотільних системах. Незважаючи на різні форми матеріалів м'якої речовини, більшість її властивостей мають спільну фізико-хімічну природу, зумовлену багатьма внутрішніми ступенями вільності, слабкими взаємодіями між структурними елементами та витонченим балансом між ентропійними та ентальпійними вкладами. Усвідомлення того, що м'яка речовина включає незліченні приклади порушення симетрії, узагальненої пружності та безліч флуктуюючих ступенів вільності призвело до ренесансу таких класичних напрямків, як фізика рідин (неньютонівські рідини та структуровані середовища) або ж фізики пружності (мембрани, волокна, анізотропні мережі). Успіхи в медичних та біологічних дослідженнях безпосередньо пов'язані з розвитком фізики м'якої речовини. Одним із важливих моментів усвідомлення ролі м'якої речовини в фізиці живого стає усвідомлення існування двох напрямків у біофізичних дослідженнях: фізико-хімічного та синергетичного, останній з яких базується на розгляді біологічних об'єктів як складних систем.

Ряд аспектів, пов'язаних з особливостями м'якої речовини і розвитком цього напряму досліджень в Україні, представлені в попередніх звітах, що підбивають підсумки діяльності Наукової ради до 2015 року. В цій книзі, як і в попередніх, поряд із коротким викладом основних здобутків різних наукових груп представлено також короткі огляди провідних українських вчених та найважливіші наукові результати різних наукових колективів.

Протягом звітного періоду структура і персональний склад ради зазнали ряду змін. Зокрема, утворено нову секцію – секцію комп'ютерного моделювання м'якої речовини, яку очолив д.ф.-м.н. Т.М. Брик, оновлено персональний склад ради. Сумуємо, що відійшли у вічність члени ради Ю.П. Благой, О.М. Браун, І.О. Вакарчук, Ю.Б. Гайдідей, І.П. Омелян, В.М. Сисоєв та І.В. Стасюк.

Роботи українських вчених у галузі фізики м'якої речовини знаходять визнання як в Україні, так і за кордоном. Так, за звітний період члени ради були у складі трьох авторських колективів, удостоєних Державними преміями України в галузі науки і техніки, та семи авторських колективів, які відзначені іменними преміями НАН України. Члени ради за звітний період отримали ряд державних і відомчих нагород.

Редакційна колегія висловлює вдячність усім членам ради, які надіслали свої матеріали до цього збірника, а також співробітникам ІФКС НАН України, які долучилися до підготовки цього видання.

академік НАН України І.Р. Юхновський,
член-кореспондент НАН України М.Ф. Головко

Персональний склад і структура Наукової ради з проблеми «Фізика м'якої речовини» при Відділенні фізики і астрономії НАН України

Голова
Юхновський І.Р.

Заступники голови
Булавін Л.А., Головко М.Ф., Мриглод І.М.

Секретарі
Брик Т.М., Трохимчук А.Д.

Секції
Статистична фізика
Фізика рідкого стану
Рідкі кристали
Макромолекулярні та біологічні системи
Комп'ютерне моделювання м'якої речовини

Бюро

Юхновський І.Р.,	акад. НАН України, ІФКС НАН України, Львів-Київ
Булавін Л.А.,	акад. НАН України, КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Головко М.Ф.,	чл.-кор. НАН України, ІФКС НАН України, Львів
Мриглод І.М.,	акад. НАН України, ІФКС НАН України, Львів
Загородній А.Г.,	акад. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Петров Е.Г.,	чл.-кор. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Томчук П.М.,	чл.-кор. НАН України, ІФ НАН України, Київ
Брик Т.М.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Трохимчук А.Д.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів

Секція статистичної фізики

Головко М.Ф.,	чл.-кор. НАН України, ІФКС НАН України, Львів – голова
Пацаган О.В.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів – секретар
Бакай О.С.,	акад. НАН України, ІТФ ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
Загородній А.Г,	акад. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Мриглод І.М.,	акад. НАН України, ІФКС НАН України, Львів
Пелетминський С.В.,	акад. НАН України, ІТФ ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
Слюсаренко Ю.В.,	акад. НАН України, ІТФ ім.О.І.Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
Стасюк І.В.,	чл.-кор. НАН України, ІФКС НАН України, Львів
Адамян В.М.,	д.ф.-м.н., ОНУ імені І.І. Мечнікова, Одеса
Вакарчук І.О.,	д.ф.-м.н., ЛНУ імені Івана Франка, Львів
Гончар М.С.,	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М.Боголюбова НАН України, Київ
Держко О.В.	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Дудка М.Л.	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Ковалевський М.Ю.,	д.ф.-м.н., ІТФ ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
Сисоєв В.М.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Сотніков А.Г.	д.ф.-м.н., ІТФ ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
Токарчук М. В.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Швайка А.М.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів

Секція фізики рідкого стану

Булавін Л.А.,	акад. НАН України, КНУ імені Тараса Шевченка, Київ – голова
Остапчук Ю.Л.,	к.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ – секретар
Слісенко В.І.,	акад. НАН України, ІЯД НАН України, Київ
Рудавський Е.Я.,	чл.-кор. НАН України, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України, Харків
Альохін О.Д.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Вільчинський С.Й.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Гаврюшенко Д.А.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Калюжний Ю.В.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Клепко В.В.,	д.ф.-м.н., ІХВМС НАН України, Київ
Козловський М.П.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Лебовка М.І.,	д.ф.-м.н., Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України, Київ
Мазур В.О.,	д.ф.-м.н., Одеська національна академія харчових технологій, Одеса
Маломуж М.П.,	д.ф.-м.н., ОНУ імені І.І. Мечникова, Одеса
Мудрий С.І.,	д.ф.-м.н., ЛНУ імені Івана Франка, Львів
Носенко В.К.,	д.ф.-м.н., ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ
Плевачук Ю.О.,	д.ф.-м.н., ЛНУ імені Івана Франка, Львів
Чалий О.В.,	д.ф.-м.н., НМУ ім. О.О. Богомольця МОЗ України, Київ

Секція рідких кристалів

Томчук П.М.,	чл.-кор. НАН України, ІФ НАН України, Київ – голова
Лев Б.І,	акад. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ – заступник голови
Назаренко В.Г.,	д.ф.-м.н., ІФ НАН України, Київ – секретар
Сорокін В.М.,	чл.-кор. НАН України, ІФН ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ
Сугаков В.Й.,	чл.-кор. НАН України, ІЯД НАН України, Київ
Гриценко М.І.,	д.ф.-м.н., НУ «Чернігівський колегіум» ім. Т.Г. Шевченка, Чернігів
Ільницький Я.М.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Кисельов О.Д.,	д.ф.-м.н., ІФ НАН України, Київ
Лисецький Л.М.,	д.ф.-м.н., Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України, Харків
Микитюк З.М.,	д.т.н., НУ «Львівська політехніка», Львів
Настишин Ю.А.,	д.ф.-м.н., Інститут фізичної оптики ім. О.Г. Влоха МОН України, Львів
Пергаменщик В.М.,	д.ф.-м.н., ІФ НАН України, Київ
Погорєлов В.Є.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Решетняк В.Ю.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ

Секція макромолекулярних та біологічних систем

Петров Е.Г.,	чл.-кор. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ – голова
Волков С.Н.,	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ – секретар
Веселовський М.С.,	акад. НАН України, Інститут фізіології ім. О.О. Богомольця НАН України, Київ
Головач Ю.В.,	акад. НАН України, ІФКС НАН України, Львів
Карачевцев В.О.,	чл.-кор. НАН України, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України, Харків
Корнелюк О.І.,	чл.-кор. НАН України, ІМБГ НАН України, Київ
Стойка Р.С.,	чл.-кор. НАН України, ІБК НАН України, Львів
Суходуб Л.Ф.,	чл.-кор. НАН України, СДУ, Суми
Благой Ю.П.,	д.ф.-м.н., ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України, Харків
Брижик Л.С.,	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Висоцький В.І.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Гайдідей Ю.Б.,	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Довбешко Г.І.,	д.ф.-м.н., ІФ НАН України, Київ
Забашта Ю.Ф.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Карбівський В.Л.,	д.ф.-м.н., ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ
Малєєв В.Я.,	д.ф.-м.н., ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України, Харків
Христофоров Л.М.,	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ

Секція комп'ютерного моделювання м'якої речовини

Брик Т.М.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів – голова
Баумкетнер А.Б.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів – секретар
Антонов В.М.,	чл.-кор. НАН України, ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ
Браун О.М.,	чл.-кор. НАН України, ІФ НАН України, Київ
Атамась Н.О.,	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Блавацька В.Б.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Єсилевський С.О.,	д.ф.-м.н., ІФ НАН України, Київ
Ляшенко Я.О.,	д.ф.-м.н., СДУ, Суми
Мартинов Є.С.,	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Омелян І.П.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Пацаган Т.М.	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Трохимчук А.Д.,	д.ф.-м.н., ІФКС НАН України, Львів
Шестопалова Г.В.,	д.ф.-м.н., ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України, Харків

Список установ,
діяльність яких у галузі фізики м'якої речовини координується науковою радою

- Інститут фізики (ІФ) НАН України, Київ
- Інститут теоретичної фізики (ІТФ) ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
- Фізико-технічний інститут низьких температур (ФТІНТ) ім. Б.І. Вєркіна, Харків
- Інститут фізики конденсованих систем (ІФКС) НАН України, Львів
- Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» (ННЦ ХФТІ) НАН України, Харків
- Інститут металофізики (ІМФ) ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ
- Інститут ядерних досліджень (ІЯД) НАН України, Київ
- Інститут фізики напівпровідників (ІФН) ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ
- Інститут радіофізики та електроніки (ІРЕ) ім. О.Я. Усикова НАН України, Харків
- Радіоастрономічний інститут (РІ) НАН України, Харків
- Інститут прикладної фізики (ІПФ) НАН України, Суми
- Інститут магнетизму (ІМаг) НАН та МОН України, Київ
- Інститут прикладних проблем фізики і біофізики (ІППФБ) НАН України, Київ
- Інститут фізики гірничих процесів (ІФГП) НАН України, Дніпро
- Міжнародний центр «Інститут прикладної оптики» (МЦ ІПО) НАН України, Київ
- Інститут математики (ІМ) НАН України, Київ
- НТК «Інститут монокристалів» (НТК ІМ) НАН України, Харків
- Інститут проблем безпеки атомних електростанцій (ІПБАЕ) НАН України, Чорнобиль-Київ
- Інститути Секції хімічних і біологічних наук НАН України
- Київський національний університет (КНУ) імені Тараса Шевченка, Київ
- Львівський національний університет (ЛНУ) імені Івана Франка, Львів
- Одеський національний університет (ОНУ) ім. І.І. Мечникова, Одеса
- Сумський державний університет (СДУ), Суми
- Харківський національний університет (ХНУ) ім. В.Н. Каразіна, Харків
- Національний університет «Львівська політехніка» (НУ ЛП), Львів

Короткі наукові огляди
з актуальних проблем фізики м'якої речовини

Кінетика низькотемпературного газу водневоподібних атомів у зовнішньому електромагнітному полі

А.Г. Загородній[1)], О.Ю. Слюсаренко[2)], Ю.В. Слюсаренко[2)]
([1)]Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
[2)]Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України)

Перший сплеск зацікавленості до тематики досліджень, результати яких стисло викладено в даній роботі, виник у другій половині минулого століття, коли встановилась класифікація плазми за її характеристиками та властивостями, було досягнуто розуміння основних властивостей квантової плазми й слабко іонізованих газів. Зазначимо, що наразі кількість публікацій з фізики плазми, слабко іонізованих газів, включаючи монографії й підручники, настільки величезна, що ми змушені відіслати читачів до двох наших робіт [1,2], де можна знайти основні посилання, які відмічають (з урахуванням наявних у цих джерелах посилань) певну хронологію досліджень. Відмітимо також, що викладення наступного матеріалу даної статті буде відбуватися у відповідності з цими роботами і близько (але значно скорочено) відображати їх зміст.

Різке поновлення цікавості до вивчення кінетичних процесів у квантових газах зобов'язане інтенсивним дослідженням систем із бозе-ейнштейнівським конденсатом (БЕК). Як відомо, явище БЕК уперше було реалізовано в парах лужних металів за температур порядку сотень нанокельвінів (квантові гази)! Найбільш вагомим аргументом на користь вивчення кінетики слабко іонізованих чи слабко збуджених газів є унікальні ефекти взаємодії таких систем з електромагнітними полями і, перш за все, явище сильного уповільнення і навіть зупинки світла в газах із БЕК. Можливість реалізації такого режиму було продемонстровано експериментально. За участі одного із авторів даної роботи для послідовного опису взаємодії електромагнітних хвиль із газами за наявності БЕК було розвинуто мікроскопічний підхід, заснований на новому формулюванні методу вторинного квантування за наявності зв'язаного стану частинок [3]. Розроблені методики дозволили, зокрема, обґрунтувати принципову можливість спостереження сильного уповільнення світла в ультрахолодних розріджених газах із БЕК без використання штучно стимульованої прозорості поблизу резонансів. Крім цього, в рамках запропонованих мікроскопічних підходів було проілюстровано можливість уповільнення мікрохвиль до

значень групової швидкості порядку 0.01 см/с, передбачено можливість керування груповою швидкістю світла за допомогою зовнішнього магнітного поля, фільтрації подібними системами електромагнітних сигналів і навіть «курйозна» ситуація прискорення заряджених частинок в ультрахолодних газах із БЕК. Підкреслимо, що в перерахованих випадках системи багатьох тотожних частинок знаходяться за наднизьких температур, що є за сучасних експериментальних можливостях необхідною умовою реалізації атомарного чи молекулярного БЕК.

Крім того, приблизно десяток років тому було заявлено про спостереження БЕК фотонів в умовах експерименту в спеціальному фарбнику, причому за кімнатних температур. Незабаром з'явилася низка теоретичних робіт, присвячених опису й поясненню такого явища; у деяких із них передбачалися можливості реалізації БЕК фотонів і в збуджених газах, і навіть у квантовій плазмі. В останніх випадках кінетичні процеси у формуванні БЕК фотонів відіграють виключно важливу роль. Зокрема, в зазначених системах вони формують ефективну масу фотону («масу спокою») й відповідальні за термалізацію фотонів у речовині, що дозволяє добитися зниження температури фотонної підсистеми і, як наслідок, досягнення в ній стану з БЕК. Окрім цього, в процесі експериментальної реалізації режиму з БЕК фотонів необхідна можливість збільшення густини фотонів у середовищі. Таке збільшення досягається додатковою накачкою фотонів у середовище (в ультрахолодний газ, наприклад) зовнішнім електромагнітним полем (лазером). Посилання на роботи, що відображують перераховані вище результати, можна знайти в [1,2].

Таким чином, при описі явищ та ефектів, пов'язаних із формуваннями БЕК фотонів у збуджених газах і слабко іонізованій плазмі, на передній план виходить задача про побудову кінетичної теорії таких систем, тобто, про виведення пов'язаної системи кінетичних рівнянь для всіх можливих компонент системи. Така теорія повинна бути мікроскопічною, тобто, побудованою з перших принципів, і враховувати можливість впливу на систему зовнішнього електромагнітного поля. З огляду на такі обставини, необхідний мікроскопічний підхід до розвитку кінетичної теорії слабко збуджених газів чи слабко іонізованої плазми в електромагнітному полі було побудовано на основі методу скороченого опису релаксаційних процесів у багаточастинкових системах.

Зазначимо, що побудові кінетичної теорії частково іонізованої плазми в рамках квантово-механічної теорії присвячено низку глав монографії [4]. У ній підхід до виведення кінетичних рівнянь для структурних одиниць системи складається з двох етапів. Спочатку будувалося кінетичне рівняння для функції розподілу пар різнойменно заряджених частинок. Потім, після аналізу ролі флуктуацій різних характеристик і полів, уводилась умова послаблення кореляцій при переході частинок зі зв'язаного стану до вільних.

Це дозволяло внаслідок застосування низки наближень (узагалі кажучи, слабко контрольованих) перейти від одного рівняння для функції розподілу пар частинок до системи трьох кінетичних рівнянь для функцій розподілу електронів, іонів та атомів. На основі розвинутих підходів з'являлася можливість розв'язку низки задач, наприклад, побудувати статистичну теорію гальмівного випромінювання в плазмово-молекулярних системах [5]. Однак, із огляду на згадані слабко контрольовані наближення, використані в [4], знову виникає питання про побудову кінетичної теорії частково іонізованої плазми в рамках перших принципів квантової статистики.

Метод скороченого опису нерівноважних процесів для класичних (не квантових) систем багатьох частинок був запропонований М.М. Боголюбовим [6]. На випадок квантових систем багатьох частинок цей метод був узагальнений С.В. Пелетминським [7]. Цей метод довів свою ефективність в описі незворотних процесів в системах зі спонтанно порушеною симетрією (тверде тіло, магнетики, надплинні й надпровідні системи). Він продемонстрував свою перспективність при вивченні особливості релаксаційних процесів в системах з довгими нерівноважними флуктуаціями, системах нейтронів, що взаємодіють з гідродинамічними середовищами і навіть прототипах активних середовищ. Посилання на відповідні оригінальні роботи можна знайти в [1,2]. І саме в цих роботах можна знайти детальне викладення тих обчислень, які врешті-решт приводять до рівнянь кінетики для слабко збуджених газів чи слабко іонізованої плазми в електромагнітному полі.

Нагадаємо, що метод скороченого опису ефективний, коли гамільтоніан системи можна розбити на два доданки, $\hat{\mathcal{H}}_0$ і $\hat{V}$,

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V},$$

де $\hat{\mathcal{H}}_0$ включає в себе основні взаємодії, а $\hat{V}$ описує відносно слабкі взаємодії і може містити взаємодію із зовнішнім електромагнітним полем [3]. Що стосується слабко збуджених газів чи слабко іонізованої плазми в електромагнітному полі, то під гамільтоніаном $\hat{\mathcal{H}}_0$ слід розуміти суму гамільтоніанів вільних (не взаємодіючих) частинок усіх компонентів системи [1,2], тоді як $\hat{V}$ має містити взаємодії між частинками всіх підсистем а також взаємодію із зовнішнім електромагнітним полем. У згаданих роботах вважалося, що компонентами системи, яка описується, є вільні різнойменно заряджені ферміони двох сортів, узагалі кажучи – електрони та іони – остови, та їх зв'язані стани – водневоподібні атоми (аналог атомів лужних металів), які можуть перебувати як в основному, так і в збуджених станах. Крім того, враховувалася можливість взаємодії випромінювання (фотонів), які взаємодіють із усіма перерахованими компонентами-підсистемами.

За параметри скороченого опису згаданих систем на кінетичному етапі їх еволюції взято вігнерівські функції розподілу, для яких і здобувалися пов'язані рівняння еволюції. Тут наведемо лише кінцевий результат – для вігнерівських функцій розподілу систему кінетичних рівнянь, яким вдалося надати калібрувально – інваріантного вигляду.

Отже, кінетичні рівняння для калібрувально – інваріантних функцій розподілу вільних заряджених ферміонів першого $\left(f^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p})\right)$ та другого $\left(f^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p})\right)$ сортів (електронів та остовів водневоподібних атомів) можна представити у наступному вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p};t)+\frac{\partial\varepsilon^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}\frac{\partial f^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{x}}-\frac{\partial\varepsilon^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{x}}\frac{\partial f^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}=\mathbf{F}_L^{(1)}\frac{\partial f^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}},\quad(1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p};t)+\frac{\partial\varepsilon^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}\frac{\partial f^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{x}}-\frac{\partial\varepsilon^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{x}}\frac{\partial f^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}=\mathbf{F}_L^{(2)}\frac{\partial f^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}},$$

де

$$\varepsilon^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p})=\varepsilon_1(\mathbf{p})-U^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p};f)-U(\mathbf{x},\mathbf{p};f),\qquad \varepsilon_1(\mathbf{p})=\frac{p^2}{2m_1},\quad(2)$$

$$\varepsilon^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p})=\varepsilon_2(\mathbf{p})-U^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p};f)+U(\mathbf{x},\mathbf{p};f),\qquad \varepsilon_2(\mathbf{p})=\frac{p^2}{2m_2}.$$

Сили Лоренца $\mathbf{F}_L^{(1,2)}$, що діють на обидва сорти ферміонів, визначаються звичним чином:

$$\mathbf{F}_L^{(1)}\equiv e\left\{\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{x},t)+\frac{\mathbf{p}}{m_1c}\times\mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{x},t)\right\},$$

$$\mathbf{F}_L^{(2)}\equiv -e\left\{\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{x},t)+\frac{\mathbf{p}}{m_2c}\times\mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{x},t)\right\}.\quad(3)$$

Крім того, в (2) уведено наступні позначення:

$$U^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p};f)\equiv\frac{e^2}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{p}'}f^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{p}')\nu(\mathbf{p}'-\mathbf{p}),\quad(4)$$

$$U^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p};f)\equiv\frac{e^2}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{p}'}f^{(2)}(\mathbf{x},\mathbf{p}')\nu(\mathbf{p}'-\mathbf{p}),$$

$$U(\mathbf{x},\mathbf{p};f)\equiv\frac{e}{\mathcal{V}}\int d\mathbf{x}'\nu(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\left[\mathbf{d}_{\alpha_1'\alpha_3'}\sum_{\mathbf{p}_3'}\frac{\partial f^{(0)}_{\alpha_3',\alpha_1'}(\mathbf{x}',\mathbf{p}_3')}{\partial\mathbf{x}'}-e\left(\sum_{\mathbf{p}_3'}f^{(1)}(\mathbf{x}',\mathbf{p}_3')-\sum_{\mathbf{p}_3'}f^{(2)}(\mathbf{x}',\mathbf{p}_3')\right)\right],$$

причому

$$\nu(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\equiv\frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{k}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\nu(\mathbf{k}),\quad(5)$$

де функція $\nu(\mathbf{k})$ із точністю до величини елементарного заряду e співпадає з Фур'є – образом кулонівського потенціалу:

$$\nu(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{\mathbf{k}^2}. \tag{6}$$

При отриманні рівнянь (1) і виразів (2), (4) була використана кулонівське калібрування для зовнішнього електромагнітного поля

$$\operatorname{div} \mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{x},t) = 0, \tag{7}$$

($\mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{x},t)$ – векторний потенціал зовнішнього електромагнітного поля), і вираз для тензора дипольних моментів $\mathbf{d}_{\alpha\beta}$, що визначається наступними формулами:

$$\mathbf{d}_{\alpha\beta} \equiv e\int d\mathbf{y}\,\varphi_\alpha^*(\mathbf{y})\,\mathbf{y}\,\varphi_\beta(\mathbf{y}), \qquad \int d\mathbf{x}\varphi_\alpha^*(\mathbf{x})\varphi_\beta(\mathbf{x}) = \delta_{\alpha\beta}, \tag{8}$$

в яких $\varphi_\alpha(\mathbf{y})$ – хвильова функція зв'язаного стану ферміонів двох сортів (водневоподібного атома). Індексами «α» чи «β» в (8) позначено весь набір квантово-механічних характеристик відповідного стану, в якому перебуває водневоподібний атом.

Для калібрувально-інваріантної вігнерівської функції розподілу $f^{(0)}_{\alpha_1,\alpha_2}(\mathbf{x},\mathbf{p})$ водневоподібних атомів, яка входить і до (1), див. також (4), кінетичне рівняння має вигляд більш складний, завдяки ще й тій обставині, що ця функція від координат та імпульсу лишається одночастинковою матрицею густини за індексами α_1, α_2:

$$\frac{\partial f^{(0)}_{\alpha_1,\alpha_2}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial t} + i\left[\varepsilon^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{p}), f^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{p})\right]_{\alpha_1\alpha_2} = \tag{9}$$

$$= -\frac{1}{2}\left\{\frac{\partial\varepsilon^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}, \frac{\partial f^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{x}}\right\}_{\alpha_1\alpha_2} + \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial\varepsilon^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{x}}, \frac{\partial f^{(0)}(\mathbf{x},\mathbf{p})}{\partial\mathbf{p}}\right\}_{\alpha_1\alpha_2},$$

де операції типу $[A,B]_{\alpha_1\alpha_2}$, $\{A,B\}_{\alpha_1\alpha_2}$ для довільних матриць $A_{\alpha\beta}$, $B_{\alpha\beta}$ одного рангу визначаються формулами:

$$[A,B]_{\alpha_1\alpha_2} \equiv A_{\alpha_1\beta}B_{\beta\alpha_2} - B_{\alpha_1\beta}A_{\beta\alpha_2}, \qquad \{A,B\}_{\alpha_1\alpha_2} \equiv A_{\alpha_1\beta}B_{\beta\alpha_2} + B_{\alpha_1\beta}A_{\beta\alpha_2}. \tag{10}$$

Величина $\varepsilon^{(0)}_{\alpha_1,\alpha_2}(\mathbf{x},\mathbf{p})$, що відповідальна за еволюцію функції розподілу атомів у відповідності з рівнянням (9), дається формулою:

$$\varepsilon^{(0)}_{\alpha_1,\alpha_2}(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \varepsilon_{\alpha_1}(\mathbf{p})\delta_{\alpha_1\alpha_2} + U^{(0)}_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{x},\mathbf{p};f) + U_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{x},\mathbf{p};f) + U^{(e)}_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{x},\mathbf{p};f), \tag{11}$$

де також уведено позначення:

$$U_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{x},\mathbf{p};f) = -\frac{1}{\mathcal{V}}\int d\mathbf{x}'\nu(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\sum_{\mathbf{p}'}\left(\mathbf{d}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}'}\right)_{\alpha_1\alpha_2}\left(\mathbf{d}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}'}\right)_{\alpha_1'\alpha'} f^{(0)}_{\alpha',\alpha_1'}(\mathbf{x}',\mathbf{p}') - \tag{12}$$

$$-\frac{e}{\mathcal{V}}\int d\mathbf{x}'\nu\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}'\right)\left(\mathbf{d}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}'}\right)_{\alpha_1\alpha_2}\left(\sum_{\mathbf{p}'}f^{(1)}\left(\mathbf{x}',\mathbf{p}'\right)-\sum_{\mathbf{p}'}f^{(2)}\left(\mathbf{x}',\mathbf{p}'\right)\right),$$

$$U^{(0)}_{\alpha_1\alpha_2}\left(\mathbf{x},\mathbf{p}\right)\equiv\frac{4\pi}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{p}'}\left(\mathbf{p}'-\mathbf{p}\right)^{-2}\left(\left(\mathbf{p}-\mathbf{p}'\right)\mathbf{d}\right)_{\alpha_1\alpha'}f^{(0)}_{\alpha',\alpha_1'}\left(\mathbf{x},\mathbf{p}'\right)\left(\left(\mathbf{p}'-\mathbf{p}\right)\mathbf{d}\right)_{\alpha_1'\alpha_2},$$

$$U^{(e)}_{\alpha_1\alpha_2}\left(\mathbf{x},\mathbf{p};f\right)\equiv\left(\mathbf{E}^{(e)}\left(\mathbf{x},t\right)+\frac{\mathbf{p}}{Mc}\times\mathbf{H}^{(e)}\left(\mathbf{x},t\right)\right)\mathbf{d}_{\alpha_1\alpha_2}.$$

Система рівнянь, виражена формулами (1)–(12), є розв’язком заявленої задачі – побудови кінетики низькотемпературного газу у зовнішньому електромагнітному полі з урахуванням самоузгодженого поля, тобто, у беззіткненному наближенні. У цьому зв’язку доцільно нагадати, що головна умова справедливості беззіткненного наближення а, отже, і рівнянь (1) та (9), визначається співвідношенням:

$$\tau_0 \ll t \ll \tau_r, \tag{13}$$

де τ_0 – час хаотизації, а τ_r – час релаксації системи за рахунок зіткнень між частинками. Час релаксації τ_r визначається саме інтенсивністю взаємодії $\hat{V}$, точніше, інтегралом зіткнень, що є квадратичним за взаємодією. Час релаксації прямує до нескінченності $\tau_r \to \infty$, при $\hat{V} \to 0$ (останнє співвідношення й повинне відповідати знехтуванню інтегралом зіткнень в наших викладках). Іншими словами, час релаксації великий у випадку малої взаємодії. Оскільки час хаотизації від інтенсивності взаємодії не залежить взагалі, умова (13) для багатьох систем цілком реалістична.

Слід також зазначити, що з метою спрощення викладок і більш наглядного представлення результатів нами знехтувано наявністю взаємодії компонентів системи з фотонами. Таке знехтування не є необхідним із-за якихось принципових причин. Можна було б додати до числа параметрів скороченого опису системи одночастинкову матрицю густини фотонів $f_{\lambda\mathbf{k},\lambda'\mathbf{k}'}$, де величини $\mathbf{k},\mathbf{k}'$ є хвильовими векторами, а λ,λ' – індекси поляризації. Це дозволило би отримати кінетичне рівняння для вігнерівської функції розподілу фотонів. Перш за все, звичайно, це рівняння є необхідним для опису релаксації фотонної компоненти в системі, оскільки на релаксаційні процеси в середовищі фотонна підсистема впливає слабко.

Відмітимо, що за відсутності зовнішнього електромагнітного поля наведені вище рівняння співпадають з кінетичними рівняннями з урахуванням середнього (самоузгодженого) поля [1]. На основі цих рівнянь в [1] було надано детальний аналіз законів дисперсії власних хвиль, що можуть розповсюджуватися в таких системах, та знайдено декременти їх загасання. Продемонстровано також можливість використання здобутих дисперсійних

співвідношень для власних хвиль в теорії БЕК фотонів в ультрахолодних газах, зокрема, для обчислення ефективних мас фотонів.

Окремий напрямок застосувань здобутих рівнянь відкривається в тому випадку, якщо електромагнітне поле, яке входить до них, носить стохастичний характер. Завдяки стохастичності зовнішнього поля рівняння (1), (9) з математичної точки зору є рівняннями з просторово-неоднорідним джерелом шуму, який залежить іще й від імпульсу частинки. А такі рівняння є типовими для так званих систем з активними флуктуаціями. Як відомо, в таких середовищах можливе формування структурованих упорядкованих рухів частинок за рахунок накопичення й перетворення енергії від зовнішнього поля. Таким чином, низькотемпературні слабко збуджені й слабко іонізовані гази у зовнішньому випадковому електромагнітному полі можуть слугувати прототипом саме фізичної (не хімічної, біохімічної чи ще якої!) системи з активними флуктуаціями.

Література

1. Yu.V. Slyusarenko, O.Yu. Sliusarenko, Journal of Mathematical Physics 58, (2017) 113302.
2. A.G. Zagorodny, Yu.V. Slyusarenko, and S.N. Shulga, Low Temperature Physics, 44, (2018) 1049; doi: 10.1063/1.5055846.
3. S.V. Peletminskii, Yu. V. Slyusarenko, J. Math. Phys., 2005, Vol.46, p. 022301–022335.
4. Yu. L. Klimontovich, *The Kinetic Theory of Electromagnetic Processes*, (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1983).
5. N. Bogolyubov, *Problems of Dynamical Theory in Statistical Physic*s (Providence College, Providence, RI, 1959).
6. A.I. Akhiezer and S.V. Peletminskii, *Methods of Statistical Physics* (Pergamon, Oxford, 1981).
7. Yu.L. Klimontovich, A.Yu. Shevchenko, I.P. Yakimenko, A.G. Zagorodny, Contributions to Plasma Physics, 29, 551 (1989).

Фазова поведінка іонних рідин у невпорядкованих пористих середовищах

О.В. Пацаган, Т.М. Пацаган, М.Ф. Головко
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Іонні рідини в пористому середовищі представляють не тільки значний академічний інтерес, а також є важливими з точки зору їх практичного застосування [1, 2]. Теоретичні передбачення фазової поведінки іонних рідин у невпорядкованих пористих матеріалах є важливими з огляду на можливість оцінки термодинамічної стійкості такого роду рідин в умовах просторових обмежень. У цій статті ми представляємо огляд результатів дослідження фазової поведінки в моделях іонних рідин і їх розчинів, що знаходяться у невпорядкованій пористій матриці [3–10]. Основна увага буде приділена впливу матриці на фазовий перехід типу газ-рідина і рідина-рідина в моделях, що враховують асиметрію іонів у розмірах і зарядах, а також несферичну форму молекул розчинника [6–7, 9–10].

В наших роботах використано теоретичні підходи, які зарекомендували себе як успішні при вивченні фазової поведінки іонних плинів за відсутності просторового обмеження (в об'ємі), а саме: підхід, що використовує метод колективних змінних (КЗ) [11–12] та асоціативне середньо-сферичне наближення (АССН), що використовує концепцію іонної асоціації в рамках середньо-сферичного наближення (ССН) теорії інтегральних рівнянь Орнштейна-Церніке [13–15]. Характерною рисою обох теорій є використання концепції системи відліку (СВ). Як СВ розглядаються дві моделі, а саме: (1) система, яка складається з двокомпонентної суміші твердих сфер (ТС), що знаходиться у невпорядкованій твердосферній матриці (у випадку моделі з неявним врахуванням розчинника), і (2) система, що складається з суміші ТС і твердих сфероциліндрів (ТСЦ) у невпорядкованій твердосферній матриці (коли розчинник, молекули якого мають форму ТСЦ, враховується явно).

В рамках узагальнення теорії масштабної частинки (ТМЧ) отримано аналітичний опис термодинаміки для обох систем у залежності від характеристик невпорядкованої матриці: геометричної пористості $\phi_0 = 1 - \eta_0$ (η_0 – упаковка матричних частинок), яка характеризує вільний об'єм для плину, і термодинамічної пористості ϕ, яка визначається хімічним потенціалом плину при безмежному розведенні й дорівнює імовірності знаходження вільного місця для частинки плину в порожній матриці (в границі безмежного розведення плину) [16–20]. У випадку двосортного плину ТС маємо термодинамічну пористість ϕ_i для кожного сорту i [21]. Результати, отримані для термодинамічних функцій в рамках розширеної

теорії ТМЧ, було використано для опису СВ у вище зазначених теоретичних підходах.

Дослідження фазових переходів у системах із кулонівськими взаємодіями в об'ємі активно проводилися впродовж останніх декількох десятиліть (див. огляд [22] і цитовану в ньому літературу). В цих дослідженнях основна увага була присвячена вивченню фазового переходу газ–рідина в найпростішій моделі іонного плину, так званій обмеженій примітивній моделі (RPM – restricted primitive model), в якій іони обох знаків мають однакові діаметри і однакові абсолютні заряди. Навіть для цієї, на перший погляд, простої моделі такі добре відомі теорії, як теорія Дебая–Гюккеля (ДГ) і ССН, забезпечують виключно якісний опис фазової рівноваги газ–рідина. Справжнім викликом для теорії стала примітивна модель (ПМ), що враховує асиметрію іонів у розмірах і зарядах. Виявилося, що в рамках вище згаданих теорій неможливо пояснити вплив асиметрії на критичну точку газ-рідина без додаткових припущень навіть на якісному рівні. Успіх у вивченні впливу асиметрії в розмірах іонів на фазову діаграму було досягнуто в рамках теорії АССН [23]. Проте, цей підхід не дозволив врахувати зарядову асиметрію іонів. На даний час єдиною теорією, що дозволяє описати поведінку критичних параметрів газ–рідина зі зміною асиметрії як в розмірах так і в зарядах, є теорія, що використовує метод КЗ у поєднанні з концепцією СВ. Основною відмінністю цього підходу від згаданих теорій є можливість побудови теорії збурень і, на цій основі, врахування кореляційних ефектів вищого порядку, ніж гаусовий. Це дозволило, використовуючи оригінальний метод, запропонований в [24], отримати явний вираз для хімічного потенціалу, спряженого до параметра порядку для фазового переходу газ–рідина, який враховує дво- і тричастинкові кореляції між негативно і позитивно зарядженими іонами, та побудувати фазові діаграми ПМ для набору параметрів $\lambda = \sigma_+ / \sigma_-$ і $z = q_+ / |q_-|$, де σ_i і q_i – діаметр і заряд іона сорту i [25]. Таким чином, вперше отримано залежності критичних параметрів і форми кривої співіснування від зміни параметрів λ і z, які якісно узгоджуються з результатами комп'ютерного експерименту [26, 27].

Примітивна модель іонного плину в невпорядкованій матриці

Розглянемо асиметричну двокомпонентну ПМ іонного плину в матриці незаряджених ТС. ПМ складається з N_+ позитивно заряджених ТС із зарядом q_+ і N_- негативно заряджених ТС із зарядом q_-, що знаходяться в безструктурному середовищі з діелектричною сталою ε. При цьому система в цілому є електронейтральною. Потенціал взаємодії між іонами має вигляд:

$$u_{\alpha\beta}(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma_{\alpha\beta} \\ \dfrac{q_\alpha q_\beta}{\varepsilon r}, & r \geq \sigma_{\alpha\beta} \end{cases}. \qquad (1)$$

Ми представляємо систему матриця–рідина як «частково заморожену» модель [28], що включає в себе дві підсистеми: власне матрицю, сформовану нерухомими («замороженими») частинками, і підсистему, що складається з протилежно заряджених іонів, які рухаються в матриці і перебувають з нею у рівновазі. Припускається, що частинки матриці були «заморожені» в рівноважну конфігурацію відповідно до розподілу Гіббса з парним потенціалом взаємодії за відсутності рідини. В цьому випадку, статистико–механічне середнє стає подвійним середнім: спочатку усереднення здійснюється за всіма ступенями вільності іонної рідини при фіксованій конфігурації «заморожених» частинок, а потім усереднення виконується за всіма можливими реалізаціями матриці. Застосування методу реплік $-\beta\Omega = \beta PV = \lim_{s\to 0}\frac{d}{ds}\ln \Xi^{rep}(s)$ дозволяє встановити зв'язок між величинами, отриманими внаслідок подвійного усереднення, і термодинамічними величинами повністю рівноважної («реплікованої») системи [29–30].

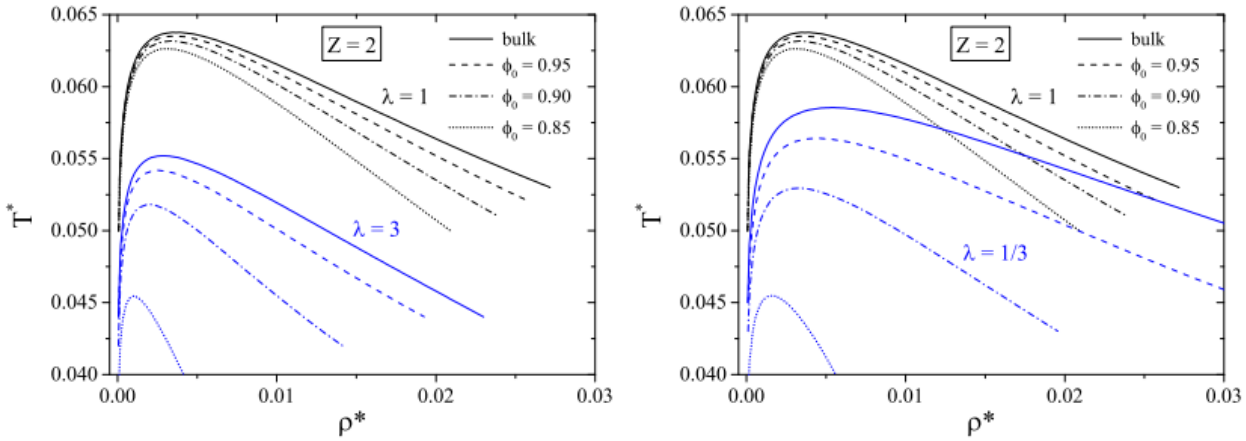


Рис. 1. Фазові діаграми газ-рідина асиметричної ПМ із $z = 2$ в матриці різної пористості ϕ_0 при фіксованому значенні розміру матричних частинок $\lambda_0 = 1$, але різному співвідношенні розмірів протилежно заряджених іонів λ. $T^* = k_B T\varepsilon\sigma_\pm / zq^2$, $\rho^* = \rho\sigma_\pm^3$, $\sigma_\pm = (\sigma_+ + \sigma_-)/2$. Рисунки взято з [7].

Використовуючи метод КЗ у рамках описаного вище сценарію, а також метод, раніше запропонований при дослідженні фазової поведінки ПМ в об'ємі, нами отримано для ПМ іонного плину в матриці незаряджених ТС у випадку, коли нехтується взаємодією між іонами і матрицею поза твердим кором, явний вираз для хімічного потенціалу, спряженого до параметра

порядку для фазового переходу газ–рідина, який містить довгохвильові частини дво- і тричастинкових структурних факторів СВ, що виражаються через термодинамічні функції СВ [6]. Аналітичні вирази для тиску і парціальних хімічних потенціалів багатосортної системи ТС у твердосферній багатосортній матриці отримано в [21]. На основі цього вперше побудовано фазові діаграми газ–рідина для значень параметра зарядової асиметрії $z = 1$ і $z = 2$ та для різних значень параметра асиметрії в розмірах іонів λ ($\sigma_+ \geq \sigma_-$ і $\sigma_+ < \sigma_-$), а також при різних характеристиках матриці таких, як геометрична пористість ϕ_0 і розмір матричних частинок σ_0, ввівши $\lambda_0 = \sigma_0 / \sigma_-$ (див. Рис. 1, 2) [6, 7].

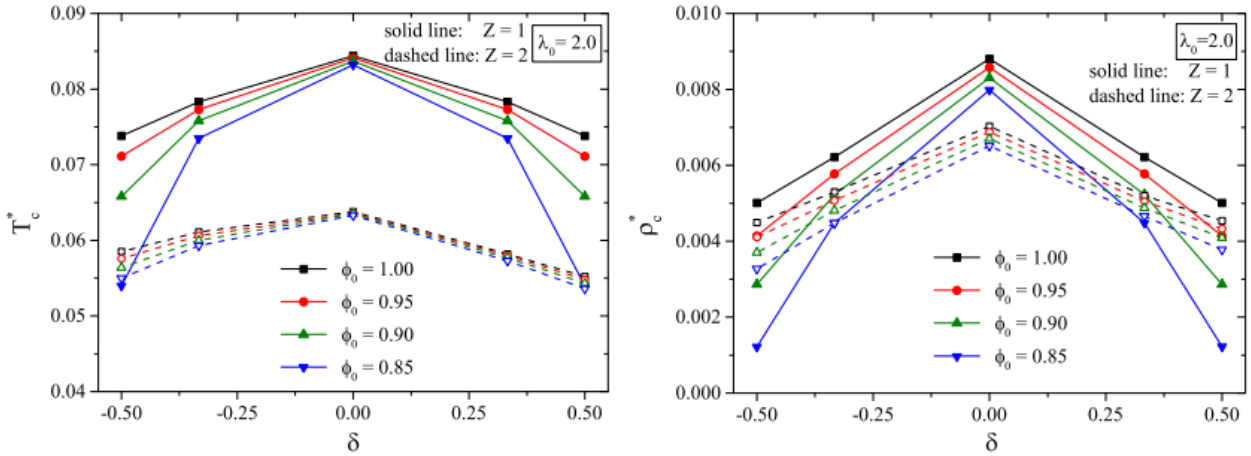


Рис. 2. Критична температура T_c^* (ліворуч) і критична густина ρ_c^* (праворуч) асиметричної ПМ як функції параметра розмірної асиметрії $\delta = (\lambda - 1)/(\lambda + 1)$ в об'ємі ($\phi_0 = 1.0$) і в матрицях різної пористості ϕ_0, але при фіксованому розмірі матричних частинок $\lambda_0 = 2$. Суцільні лінії відповідають випадку $z = 1$, пунктирні лінії – $z = 2$. $T^* = k_B T \varepsilon \sigma_\pm / zq^2$, $\rho^* = \rho \sigma_\pm^3$, $\sigma_\pm = (\sigma_+ + \sigma_-)/2$. Рисунки взято з [7].

З рис. 1 видно, що зменшення пористості ϕ_0 веде до зсуву фазової діаграми в область нижчих температур і густин, а область співіснування звужується. З іншого боку, область фазової рівноваги у випадку $z = 2$ може бути ширшою завдяки асиметрії в розмірах іонів, як це видно з рис. 1 (праворуч) для $\lambda = 1/3$ в об'ємному випадку і у випадку матриці високої пористості $\phi_0 = 0.95$. В той же час зменшення пористості послаблює цей ефект. Аналізуючи отримані результати при $z = 1$ і $z = 2$ (рис. 2), можна зауважити загальний вплив, спричинений зміною пористості матриці на критичні температуру і густину: чим менша пористість, тим нижче опускається по температурі і густині критична точка фазового переходу

іонної рідини. Проте, спостерігається певна різниця в поведінці критичних параметрів для $z=1$ і $z=2$. Як видно з рис. 2, обидва критичних параметри T_c^* і ρ_c^* зарядоасиметричної ПМ є менш чутливими до асиметрії в розмірах іонів, а саме, вони повільніше зменшуються з δ для $z=2$ в порівнянні з випадком $z=1$. Незважаючи на те, що присутність матриці посилює зменшення T_c^* і ρ_c^* з λ, цей ефект є більше виражений у випадку $z=1$. Також зауважено, що збільшення матричних частинок при фіксованій пористості послаблює вплив просторового обмеження матриці, що приводить до росту значень критичної температури і густини. З іншого боку, зменшення розмірів матричних частинок, при фіксованій пористості, може стрімко понижувати критичні параметри та звужувати область фазового співіснування навіть до повного її зникнення. Це особливо помітно у випадку $z=1$.

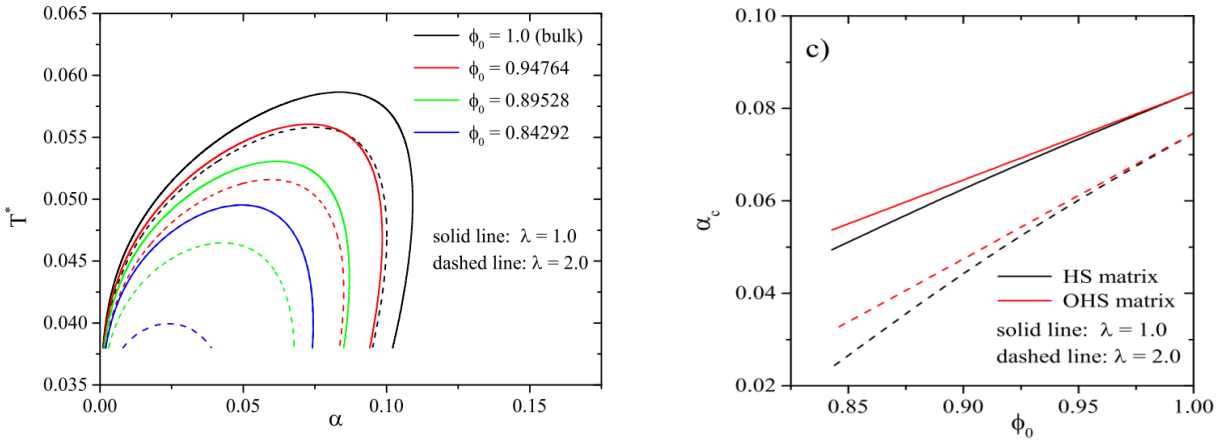


Рис. 3. Криві співіснування газ-рідина ПМ з $\lambda=1$ і $\lambda=2$ ($z=1$) в матриці HS різної пористості ϕ_0 при $\lambda_0=2$ в координатах температура – ступінь дисоціації (ліворуч) і критичний ступінь дисоціації α_c ПМ з $\lambda=1$ і $\lambda=2$ ($z=1$) в матрицях HS і OHS в залежності від пористості матриці ϕ_0 при $\lambda_0=2$ (праворуч). $T^*=k_BT\varepsilon\sigma_\pm/zq^2$, $\rho^*=\rho\sigma_\pm^3$, $\sigma_\pm=(\sigma_++\sigma_-)/2$. Рисунки взято з [5].

Фазові діаграми ПМ з асиметрією в розмірах іонів ($\lambda\neq1$, $z=1$) в матрицях різної морфології і пористості були отримані в рамках теорії, що поєднує підхід АССН з теорією ТМЧ [7]. Зокрема, розглянуто невпорядковану матрицю двох типів: (i) матриця сформована звичайними незарядженими твердими ТС (HS матриця); (ii) матриця незаряджених випадково розташованих ТС, що перетинаються (OHS матриця). Згідно АССН, іонна рідина моделювалася як суміш вільних іонів та іонних пар, що

знаходяться в хімічній рівновазі згідно закону діючих мас. При відсутності взаємодії між іонами і матричними частинками поза твердим кором вільну енергію повної системи можна представити як суму внесків від СВ, закону діючих мас та електростатичної міжіонної взаємодії. Електростатичний внесок від асиметричної в розмірах іонної підсистеми апроксимувався відповідним внеском від симетричної моделі з діаметром іонів $\sigma_{\pm}$ (т. зв. «спрощене ССН»). Це дозволило для електростатичної підсистеми звести тримасштабну задачу ($\sigma_{+}, \sigma_{-}, \sigma_{\pm}$) до одномасштабної. В рамках цього підходу також досліджено зміну частки вільних іонів α (ступінь дисоціації) вздовж кривих співіснування (рис. 3, ліворуч). На рис. 3 (праворуч) представлено критичний ступінь дисоціації іонної моделі при $\lambda = 1$ і $\lambda = 2$ у двох типах матриці (HS і OHS) різної пористості у випадку, коли $\lambda_0 = 2$. Слід зауважити, що поведінка критичної густини та критичної температури в залежності від розмірів іонів і пористості матриці, отримана в рамках теорії АССН, узгоджується з результатами, отриманими з використанням методу КЗ.

Модель іонного плину з явним врахуванням розчинника в невпорядкованій матриці

Розглянемо тепер модель іонного розчину, що явно враховує присутність розчинника та описується двокомпонентною сумішшю обмеженої примітивної моделі іонного плину (ОПМ) та нейтральних твердих сфероциліндрів (ТСЦ) – так звану суміш ОПМ-ТСЦ. Взаємодія між частинками іонної компоненти описується рівнянням (1) при умові, що $q_{+} = |q_{-}| = q$ і $\sigma_{+} = \sigma_{-} = \sigma_1$. Частинки розчинника (ТСЦ) мають форму циліндрів довжиною L_2 і діаметром σ_2, які з торців замикаються півкулями однакового діаметру σ_2. Повна густина числа частинок розчину $\rho = \rho_1 + \rho_2$, де $\rho_1 = \rho_{+} + \rho_{-}$ – густина числа частинок розчиненої речовини ($\rho_{+} = \rho_{-}$) і ρ_2 – густина числа частинок розчинника. Матриця, як і раніше, представляється невпорядковано розташованими нерухомими нейтральними ТС.

Для цієї моделі ми розвинули теоретичний підхід, який базується на комбінації теорії ТМЧ, що застосовується для опису СВ, та теорії АССН, яка використовується для врахування кулонівських взаємодій між іонами. Як СВ виступає суміш плину нейтральних ТС і ТСЦ у матриці, сформованій нейтральними ТС. Аналітичні вирази для термодинамічних функцій такої системи запропоновано в роботах [20,31]. Таким чином, для системи двокомпонентної суміші ОПМ–ТСЦ в матриці було отримано аналітичні вирази для тиску, вільної енергії та хімічних потенціалів кожної з компонент

[9,10]. На основі цього, використовуючи рівняння на фазову рівновагу, нами побудовано фазові діаграми рідина–рідина суміші ОПМ–ТСЦ.

Розрахунки проводилися для моделі з діаметром іона σ_1, рівним діаметру молекули розчинника σ_2, в той час як довжина молекули розчинника L_2 вважалася рівною діаметру матричних частинок σ_0. Щоб дослідити ефект видовженості молекул розчинника на фазову поведінку розглянуто два випадки довжини частинок: $L_2 = 5\sigma_1$ і $L_2 = 10\sigma_1$. Крім того, розрахунки проводились при трьох різних значеннях упаковки матричних частинок: $\eta_0 = 0.0$ (об'ємний випадок), $\eta_0 = 0.1$ та $\eta_0 = 0.2$. На рис. 4 і 5 представлено фазові діаграми рідина–рідина в координатах $T^* - \rho^*$ і $T^* - x_1$, де одна з фаз є збагаченою іонами, а інша – частинками розчинника. Безрозмірні одиниці виражаються у вигляді: температура $T^* = k_B T \varepsilon \sigma_1 / q^2$, тиск $P^* = P \varepsilon \sigma_1^4 / q^2$, густина $\rho^* = \rho \sigma_1^3$ та концентрація іонів $x_1 = \rho_1 / \rho$.

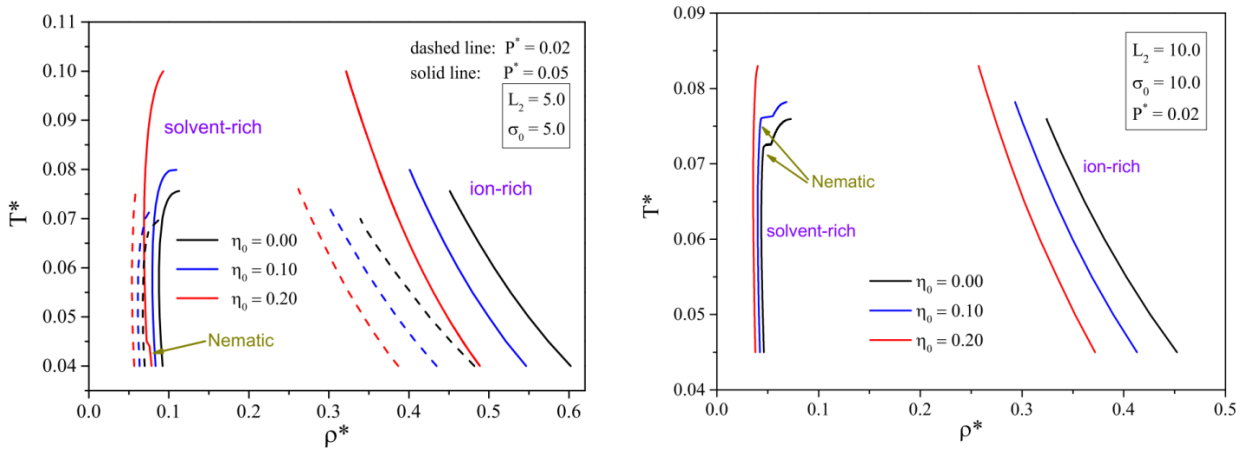


Рис. 4. Фазові діаграми рідина–рідина для суміші ОПМ–ТСЦ в матриці отримані при різних умовах та представлені в координатах $T^* - \rho^*$: (ліворуч) при тисках $P^* = 0.02$ (пунктирна лінія) і $P^* = 0.05$ (суцільна лінія) для випадку довжини частинок ТСЦ розчинника $L_2 = 5\sigma_1$; (праворуч) при тиску $P^* = 0.02$ для $L_2 = 10\sigma_1$. Позначення для різних упаковок матриці: $\eta_0 = 0.0$ (об'ємний випадок) – лінії чорного кольору, $\eta_0 = 0.1$ – синього та $\eta_0 = 0.2$ – червоного кольору.

З порівняння кривих співіснування, представлених ліворуч і праворуч на рис. 4–5, видно, що видовження частинок розчинника розширює область фазового співіснування і зсуває її в сторону вищих температур. Одночасно з цим збільшення тиску в системі спричинює зміщення фазової діаграми в

сторону більших густин і вищих температур (рис. 4, ліворуч). Також можна зауважити, що при фіксованій температурі, однаково – зменшення пористості, збільшення довжини частинок розчинника та збільшення тиску, приводять до підсилення розшарування ОПМ і ТСЦ в системі. Про це свідчить розширення області співіснування на фазових діаграмах, представлених в координатах $T^* - x_1$ (рис. 5).

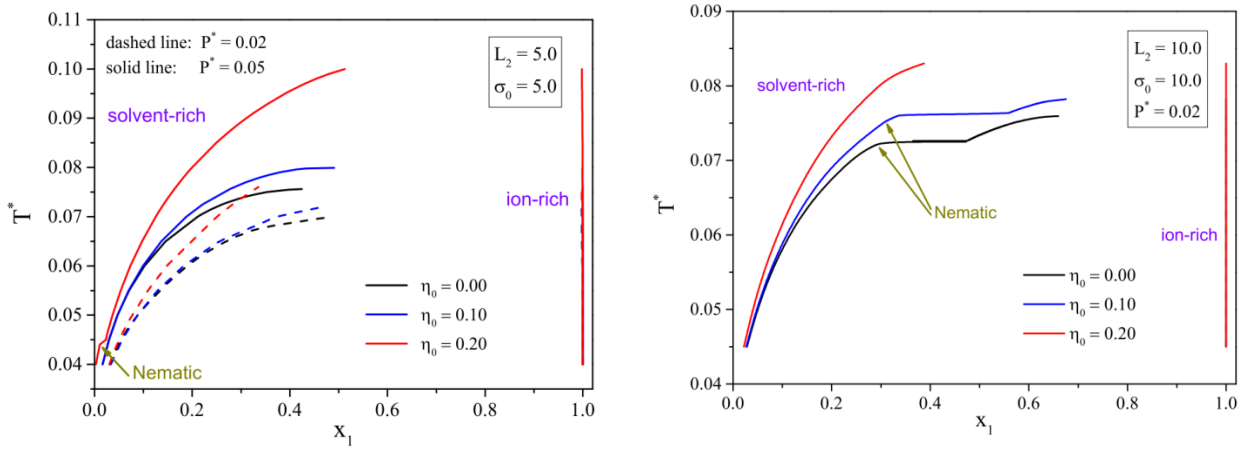


Рис. 5. Фазові діаграми рідина–рідина для суміші ОПМ–ТСЦ в матриці представлені в координатах $T^* - x_1$, де x_1 – концентрація іонів. Решта позначень такі ж, як на рис. 4.

Підсилення розшарування робить фазу, збагачену розчинником, більш гомогенною та щільнішою, що, в свою чергу, може супроводжуватися орієнтаційним впорядкуванням частинок ТСЦ розчинника та, як наслідок – виникненням нематичної фази (на рис. 4 і 5 позначено стрілками). При цьому орієнтаційне впорядкування у випадку розчинника з довшими молекулами відбувається при нижчому тиску.

Вплив невпорядкованого пористого середовища проявляється, зокрема, у зсуві області співіснування в сторону менших густин внаслідок виключеного об’єму за рахунок присутності частинок матриці (рис. 4). Поряд із цим спостерігається зсув області співіснування в бік вищих температур, який можна пояснити асоціативними взаємодіями між протилежно зарядженими іонами, роль яких зростає по мірі зменшення пористості матриці (збільшення упаковки матриці), а послаблюється лише за рахунок росту температури. Подібно до цього, ріст температури можна також побачити при збільшенні тиску, при якому асоціативні ефекти підсилюються внаслідок збільшення густини рідини.

Література

1. J. Le Bideau, L. Viau, A. Vioux, Chem. Soc. Rev., **40**, 907 (2011).
2. M.P. Singh, R.K. Singh, S. Chandra, Prog. Mater. Sci., **64**, 73 (2014).
3. M. Holovko, O. Patsahan, T. Patsahan, J. Phys.: Condens. Matter, **28**, 414003 (2016).
4. M. Holovko, T. Patsahan, O. Patsahan, J. Mol. Liq., **228**, 215 (2017).
5. M. Holovko, T. Patsahan, O. Patsahan, J. Mol. Liq., **235**, 53 (2017).
6. O.V. Patsahan, T.M. Patsahan, M.F. Holovko, Phys. Rev. E. **97**, 022109 (2018).
7. O. Patsahan, T. Patsahan, M. Holovko, J. Mol. Liq.. **270**, 97 (2018).
8. O.V. Patsahan, T.M. Patsahan, J. Mol. Phys., **275**, 443 (2019).
9. M. Hvozd, T. Patsahan, O. Patsahan, M. Holovko, J. Mol. Phys., **285**, 244 (2019).
10. М.В. Гвоздь, Т.М. Пацаган, О.В. Пацаган, М.Ф. Головко, Препринт ІФКС НАН України: ICMP-20-04U, 20с.
11. И.Р. Юхновский, М.Ф. Головко. Статистическая теория равновесных классических систем. Наукова думка, Київ, 1980.
12. O. Patsahan, I. Mryglod, J.-M. Caillol, J. Phys. Stud., **11**, No. 2, 133 (2007).
13. M.F. Holovko, In: “Ionic Soft matter: Modern trends in theory and applications”, eds. Henderson D., Holovko M., Trokhymchuk A. (Springer, Dordrecht, Netherlands) Vol. 206, p. 45–81 (2005).
14. L. Blum, O. Bernard, J. Stat. Phys., **79**, 569 (1995).
15. O. Bernard, L. Blum, J. Chem. Phys, **104**, 4746 (1996).
16. M. Holovko, W. Dong, J. Phys. Chem B, **113**, 6360 (2009).
17. T. Patsahan, M. Holovko, W. Dong, J. Chem. Phys., **134**, 074503 (2011).
18. M. Holovko, T. Patsahan, W. Dong, Pure and Appl. Chem., **85**, 115 (2013).
19. M. Holovko, V. Shmotolokha, T. Patsahan. J. Mol. Liq., **189**, 30 (2014).
20. M. Holovko, V. Shmotolokha, T. Patsahan. In “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” (Springer Proceedings in Physics, vol. 171) eds. Bulavin L., Lebovka N. (Cham: Springer) p. 3–30 (2015).
21. W. Chen, S.L. Zhao, M. Holovko, X.C. Chen, W. Dong, J. Phys. Chem B, **120**, 5491 (2016).
22. O. Patsahan, I. Mryglod, In “Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition”, ed. Holovatch Yu. (Singapore: World Scientific) Vol. 3 p. 47–92 (2012).
23. Y. Qin, J.M. Prausnitz, J. Chem. Phys., **121**, 3181 (2014).
24. O.V. Patsahan, I.M. Mryglod, J.Phys.: Condens. Matter, **18**, 10223 (2006).
25. O. V. Patsahan, T.M. Patsahan, Phys. Rev. E, **81**, 031110 (2010).
26. J.M. Romero-Enrique, G. Orkoulas, A.Z. Panagiotopoulos, M.E. Fisher, Phys. Rev. Lett., **85**, 4558 (2000).
27. Q. Yan, J.J. de Pablo, Phys. Rev. Lett., **86**, 2054 (2001).

28. W. G. Madden, E.D. Glandt, J. Stat. Phys., **51**, 537 (1988).
29. J.A. Given, G. Stell, J. Chem. Phys., **97**, 4573 (1992).
30. J.A. Given, G. Stell, Physica A, **209**, 495 (1994).
31. M. Hvozd, T. Patsahan, M. Holovko, J. Phys. Chem. B **122**, 5534 (2018).

Статистична фізика і геометрія самоґравітаційних систем

Б.І. Лев
(Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України)

Метою даного короткого огляду є представлення методу статистичної фізики, який базується на використанні нерівноважного оператора Зубарєва, і дозволяє враховувати просторово неоднорідний розподіл частинок, що взаємодіють тільки ґравітаційно. Цей метод дає змогу знайти всі термодинамічні співвідношення самоґравітаційної системи без використання ідей квантової механіки та фізики чорних дір, як це прийнято в голографічному підході. Термодинамічні співвідношення представляють екстремум статистичної суми і повністю відтворюють добре відомі рівняння загальної теорії відносності.

Вже давно виникла ідея використати загальні закони термодинаміки для пояснення ґравітації [1]. Одна з причин, за якою виникає цікавість у цьому напрямку, полягає в безуспішних спробах проквантувати ґравітацію. У квантовій теорії ґравітації існує проблема статистичного рівня опису. В цьому сенсі теорія струн, квантова ґравітація, теорія поля та моделі решітки намагаються розробити квантову геометричну заміну класичної диференціальної геометрії. Квантовий рівень опису повинен бути актуальним на надзвичайно коротких відстанях, тоді як на більших відстанях можна реконструювати її як звичайну диференціальну геометрію [2].

Альтернативна точка зору розглядає походження ґравітаційної динаміки як безпосередній прояв на макроскопічному рівні вакуумної термодинаміки. З такого припущення випливає, що саме ґравітація є лише низькоенергетичною межею відомої мікрофізики. У цьому випадку поняття полів щільності та швидкості не мають сенсу на мікроскопічному рівні і проявляються лише як середні значення. В такій індукованій ґравітаційній картині опис простору – часу з точки зору метрики розглядається як явище, дійсне на масштабах, великих, порівняно з деякою критичною довжиною, яка може бути довжиною Планка. Зокрема, існують цікаві уявлення, отримані при вивченні неґравітаційних моделей, які задають кілька аналогій між

індукованою ґравітацією та системами конденсованої речовини [3]. З таких позицій було отримано рівняння ґравітаційного поля [4].

Існує можливість встановити відповідність поведінки рідини Ріндлера виведенню рівнянь ґравітаційного поля з локальної нерівноважної просторово – часової термодинаміки. З точки зору статистичної термодинаміки, ентропія визначає кількість незалежних квантових станів, сумісних із макроскопічними параметрами. Це призводить до думки, що рівняння Ейнштейна за наявності горизонту подій виступає аналогом транспортних кінетичних рівнянь, оскільки вони є незворотними та відповідають опису нерівноважної термодинаміки. Існує локальний аналог теореми Больцмана в динаміці рідини, що рівняння динаміки супроводжуються локальним потоком ентропії. Теорема про збільшення такого потоку ентропії може бути використана для динаміки рідини, що генерується силою тяжіння [5,6]. Ефективна термодинаміка походить від певної взаємодії між незворотністю та причинністю, яка закодована у фундаментальному понятті ентропії та якось відображена в статистичному механічному описі фундаментального мікроскопічного рівня. Геометрична структура простору – часу вводиться в поняття ентропії, а горизонт подій кодується голографічним принципом [7,8]. Незважаючи на кількість різних теоретичних підходів, набір фундаментальних принципів, що ведуть до такої пропозиції, є невеликим і дуже загальним.

Однак, незважаючи на безліч доказів справедливості таких припущень, немає глибокого розуміння, чому і як ґравітація походить від ступенів свободи теорії поля. Більш просто, кількісно та якісно, можна побачити, що класичний статистичний опис та пов’язані з ним термодинамічні співвідношення ведуть до рівняння Ейнштейна навіть на класичному рівні опису. Керуючись принципом Маха «економія мислення», можна отримати рівняння тяжіння на основі статистичного підходу класичних систем як результату термодинамічних співвідношень.

У цьому короткому огляді пропонується підхід, заснований на нерівноважному статистичному операторі [9], який є більш придатним для опису самоґравітаційних систем. Рівняння стану та всі необхідні термодинамічні характеристики регулюються рівняннями, які вносять головний вклад у функцію розподілу. Основна ідея полягає в тому, щоб надати детальний опис самоґравітаційних систем, заснованих на принципах нерівноважного статистичного оператора, і запропонувати статистичне обґрунтування загальної теорії відносності. Важливим результатом цього підходу є визначення всіх необхідних термодинамічних співвідношень для систем частинок із просторовим неоднорідним розподілом.

Вивчення систем взаємодіючих частинок забезпечує серед інших переваг розробку та перевірку основних ідей статистичної механіки та термодинаміки. Системи частинок, що взаємодіють на великих відстанях,

іноді неможливо описати за допомогою звичайних термодинамічних ансамблів [10–12] і, отже, не можуть бути повністю визначені термодинамічні параметри стандартними методами рівноважної статистичної механіки. Зокрема, якщо енергія неадитивна, канонічний ансамбль непридатний для вивчення систем із дальніми взаємодіями, оскільки рівноважні стани відповідають лише локальному максимуму ентропії [9]. Термодинамічної межі не існує, але система стабільна [13]. Крім того, методи статистичного опису не дуже добре розроблені, коли необхідно враховувати просторово неоднорідний розподіл взаємодіючих частинок. Особливо це стосується, насамперед, ґравітаційних систем. З іншого боку, розподіл частинок сам визначає геометрію простору, де вони знаходяться [14]. Виникає можливість визначити геометрію розподілу речовини методами статистичної фізики.

Для цього, на наш погляд, найбільш придатним методом є нерівноважний статистичний оператор [9]. Цей метод дозволяє врахувати просторово неоднорідний розподіл взаємодіючих частинок і простежити за еволюцією системи [15]. Для визначення термодинамічних функцій систем необхідно використовувати представлення відповідних статистичних ансамблів, які враховують усі можливі стани цих систем. Із цією метою був узагальнений запропонований метод для систем із далекосяжною взаємодією [15] для врахування можливого просторово неоднорідного розподілу взаємодіючих частинок. Якщо припустити, що нерівноважні стани систем можна визначити за допомогою енергії $H(\mathbf{r})$ і щільності кількості частинок

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_i}),$$

то локальний рівноважний розподіл статистичного оператора можна записати у формі [9]:

$$Q_l = \int D\Gamma \exp\left\{-\int \left(\beta(\mathbf{r})H(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r})n(\mathbf{r})\right) d\mathbf{r}\right\}. \tag{1}$$

Інтегрування в представленій формулі здійснюється по всьому фазовому просторі системи $D\Gamma$. Потрібно зазначити, що у випадку локального рівноважного розподілу множники Лагранжа $\beta(\mathbf{r})$ та $\mu(\mathbf{r})$ є функціями просторових координат. Феноменологічна термодинаміка повинна враховувати закони збереження середнього значення фізичних параметрів як кількості частинок та енергії. Для цього слід визначити термодинамічне співвідношення для нашого випадку неоднорідних систем. Зміни статистичного оператора за рахунок множників Лагранжа визначають необхідні термодинамічні співвідношення у формі [9]:

$$-\frac{\delta \ln Q_l}{\delta\beta(\mathbf{r})} = \langle H(\mathbf{r})\rangle_l = E, \qquad \frac{\delta \ln Q_l}{\delta\mu(\mathbf{r})} = \langle n(\mathbf{r})\rangle_l = N,$$

що є природнім продовженням термодинамічних співвідношень для рівноважних систем. У загальному релятивістському випадку гамільтоніан систем взаємодіючих частинок може бути представлений як:

$$H = \sum_i \frac{m_i c^2}{\sqrt{1 - v_i^2/c^2}} - \frac{1}{2}\sum_{i,j} W(\mathbf{r_i r_j}).$$

Після математичних маніпуляцій з використанням методів теорії поля [16–18] можна знайти статистичний оператор для самоґравітаційних систем. З екстремуму статистичної суми можна знайти середнє значення енергії системи

$$E = \int m(\mathbf{r})c^2\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \int W(\mathbf{r},\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' + \int kT\rho(\mathbf{r})\ln\rho(\mathbf{r})\Lambda^3(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad (2)$$

де остання частина цього співвідношення в точності відтворює вираз для ентропії що дозволяє визначити вільну енергію системи [19], а перший член відповідає густині енергії матерії. Тут використано означення локальної теплової довжини де Бройля

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\hbar^2\beta(\mathbf{r})}{2m(\mathbf{r})}}.$$

Будь-яка фізична теорія базується на постульованих геометричних властивостях простору. Проблема геометрії в цілому еквівалентна проблемі поведінки полів, що утворюють простір [20–23]. Тепер можна запропонувати геометричний опис термодинамічно стабільного розподілу самоґравітаційних систем. Характер та інтенсивність взаємодії в системах визначають ефективну геометрію середовища, яка забезпечується мінімумом вільної енергії [14]. Слід нагадати, що після перетворення Віка інтеграція вільної енергії за часом зводиться до дії в просторі Мінковського. З теореми віріала [24,25] можна стверджувати, що перша частина вільної енергії представляє собою середнє значення тензора енергії – імпульсу вільних частинок. Після цього слід врахувати частину енергії, яка витрачається на розподіл речовини, що утворює геометрію [14]:

$$S_g = \frac{1}{c}\int W(\mathbf{r},\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'dct \simeq -\frac{c^2}{32\pi G}\int Rd\Omega,$$

де R є кривизна простору. Відповідно до загальної теорії відносності рівняння Ейнштейна для кривизни може бути отримано у добре відомій формі

$$R_{ij} - \frac{1}{2}Rg_{ij} = \frac{8\pi G}{c^4}T_{ij}$$

з мінімуму дії S_m+S_g. Всі необхідні виклади можна знайти в роботі [26].

З попереднього розгляду можна зробити усталений висновок, що геометрію Всесвіту створює ґравітаційна взаємодія. Без розподілу матерії ми не можемо говорити ні про яку геометрію. Індукований термодинамікою розподіл речовини повністю визначає її геометрію. Така інтерпретація геометрії дозволяє простежити за еволюцією системи і відповідає на запитання, чим можна обґрунтувати загальні релятивістські рівняння на основі статистичних методів опису поведінки систем з ґравітаційною взаємодією.

Література

1. В.Г. Барьяхтар, Ю.Л. Болотин, А.В. Тур, В. В. Яновский “Физическая ткань Вселенной”, Харьков, ИСМА (2010).
2. Goffredo Chirco PhD Thesis, International School for Advanced Studies, (2011).
3. Carlos Barcel, Stefano Liberat and Matt Visser, Living Rev. Relativity, 14, (2011), 3, http://www.livingreviews.org/lrr-2011-3.
4. T. Jacobson, Phys. Rev. Lett., **75**, 1260–1263 (1995), T. Jacobson and R. Parentani. Horizon Entropy. Found. Phys., **235**, 323, (2003), T. Jacobson. Introductory Lectures on Black Hole Thermodynamics. 2005. www.physics.umd.edu/grt/taj/776b/lectures.pdf. 19, 29.
5. T. Padmanabhan, Class. Quan. Grav., **19**, 5387, (2002), T. Padmanabhan, Rept. Prog. Phys., **73**, 046901, (2010).
6. L. Susskind and J. Uglum, Phys. Rev. D, **50**, 2700, (1994), L. Susskind, J. Math. Phys., **36**, 6377, (1995), L. Susskind and E. Witten. The Holographic bound in anti-de Sitter space. 1998. arXiv/hep-th/9805114.
7. E. Verlinde. Journal of High Energy Physics, **8**, 137 (2011), 10.1007/JHEP04(2011)029.
8. Mark Van Raamsdonk, Gen. Rel. Grav. 42: 2323–2329, 2010; Int. J. Mod. Phys. D **19** 2429, (2010), DOI: 10.1007/s10714-010-1034-0 10.1142/S0218271810018529.
9. D. N. Zubarev, *Non-equilibrium statistical thermodynamics* (Consultans Bareu, New York), (1974).
10. W. Thirring, Z. Phys. **235**, 339, (1970).
11. S. Chandrasekhar, *An introduction to the study of stellar structure*. New York: Dover Publications, (1942).
12. Pierre-Henri Chavanis, Carole Rosier, and Clement Sire, Physical Review E, **66**, 036105 (2002).
13. Victor Laliena, Nuclear Physics B 668, 403 (2003).
14. A. P. Rebesh, B. I. Lev, Phys. Lett. A, **381**, 2538, (2017) DOI:o5.0510375-9601.

15. B. I. Lev and A. Ya. Zhugaevych, Phys. Rev. E, **57**, 6460 (1998), B. I. Lev, International Journal of Modern Physics B, **25**, 2237 (2011), B. I. Lev, Journal of Modern Physics, **9**, 2223 (2018), B. I. Lev, Journal of Modern Physics, **10**, 687 (2019), B. I. Lev and A. G. Zagorodny, Phys. Rev. E, **84**, 061115 (2011).
16. H. Kleinert , *Gauge Field in Condensed Matter*, Word Scientific, Singapure, (1989).
17. J. Hubbard, Phys. Rev. Lett. **3**, 77 (1959).
18. R.L. Stratonovich, Sov. Phys. Dokl. **2**, 416 (1958); J. Hubbard, Phys. Rev. Lett. **3**, 77 (1958).
19. R. P. Feynman, *Statistical Mechanics*, California Institute of Technology, (1972).
20. D. Hilbert, *Die Grundlagen der Physik*, Koeniglichen Ges. Wiss. Goett., Math.-Phys. Kl. Nachr. (1915) 395.
21. A. Einstein, Ann. Phys. 354 (1916) 769.
22. S. Weinberg, Rev. Mod. Phys. 46 (1974) 255.
23. T.T. Wu, C.N. Yang, in: H. Mark, S. Fernbach (Eds.), *Properties of Matter under Unusual Conditions*, Wiley–Interscience, New York, (1969).
24. L.D. Landau and E. M. Lifshiz , *Field theory*, Nauka, Moskva (1973).
25. Ya.B. Zel'dovich and I.D. Novikov, *Theory of gravitation and the evolution of stars*, Nauka, Moskva (1971).
26. B.I. Lev, Thermodynamics induced geometry of self-gravitating systems arXiv:2010.09446v1 [physics.gen-ph] 1 Oct 2020.

Розвиток концепції системи відліку в теорії простих плинів

Андрій Трохимчук, Роман Мельник
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Вступ

Найбільш помітними подіями в становленні сучасної теорії плинів вважаються теорія Ван дер Ваальса та теорія збурень. Часова відстань між цими теоріями приблизно одне століття. Перша теорія є емпіричною, друга – мікроскопічною. Рівняння Ван дер Ваальса вперше передбачило існування критичної точки, але не може бути використоване для кількісних оцінок і тим більше для передбачень. Емпіричність теорії Ван дер Ваальса не дозволяє зрозуміти шляхи для її покращення. Сучасна теорія збурень є більш точною, але для отримання коректних кількісних оцінок потребує розрахунків щонайменше в наближенні другого порядку.

Концепція системи відліку (базисної або незбуреної системи) в теорії рідин та плинів була сформульована в процесі становлення теорії збурень [1–3]. В результаті, найбільш поширеними та найуспішнішими теоретичними підходами теорії збурень стали версії Баркера і Гендерсона (BH) [4] та Вікса, Чандлера і Андерсена (WCA) [5], а також методи теорії інтегральних рівнянь (Перкуса-Йевіка, середньо-сферичне або MSA, гіперланцюжкове або HNC) [2]. В усіх цих теоретичних підходах модель твердих сфер (HS) або утворює систему відліку безпосередньо, або її використовують для опису властивостей системи відліку з іншими відштовхуючими взаємодіями.

У той час як структура плинів високої густини добре описується лише силами відштовхування, аби описати термодинаміку простих рідин за допомогою теорії BH або WCA в широкому діапазоні термодинамічних умов, для отримання акуратних результатів розвинення теорії збурень необхідно розглядати до другого порядку. Це є очевидним недоліком теорії збурень, що робить її досить громіздкою для практичного застосування. Таким чином, важливе питання, яке задають інженери, полягає в тому, «як можна або потрібно модифікувати методи теорії збурень, щоб отримувати точні результати термодинаміки в найпростіших наближеннях першого порядку в широкому діапазоні густин та температур»? Більше того, можна поставити ще більш вимогливе питання, а саме, як зробити підхід середнього поля (тобто, Ван дер Ваальса) точним для всього діапазону густини та температури і, таким чином, застосовним для практичних цілей?

Нещодавно в наших роботах [6,7] було показано, що незалежно від типу і складності міжмолекулярних взаємодій, локальну (в межах першої координаційної оболонки) структуру визначає не стільки природа взаємодій (тобто чи вони є відштовхуванням, чи притяганням), як радіус їхньої дії. При цьому, поряд із короткосяжним відщтовхуванням (тверді сфери), визначальну

роль відіграє короткосяжна частина взаємодії притягання. Якщо бути точнішим, то це означає, що локальна структура рідини, а отже, і частка виключеного об'єму в усій системі, визначається короткосяжною (принаймні, у випадку неелектростатичних взаємодій) частиною загальної взаємодії, яка має бути не тільки відштовхувальною, але може також включати і короткосяжне притягання. Це відразу означає, що якщо система відліку включає також внесок притягання на коротких відстанях, то така система відліку може вже містити в собі і значну частину термодинамічної поведінки всієї системи. Ця альтернатива здається досить привабливою, оскільки вона може підвищити точність методів теорії збурень: чим більше інформації про всю систему охоплюється системою відліку, тим меншим є навантаження на внески від поправок за рахунок взаємодії збурення.

Далі дотримуємося ідеї про те, що більш відповідною системою відліку для простих рідин є система, що окрім твердосферного відштовхування включатиме також і певну частину притягальної взаємодії, що діє між молекулами системи. Ця частина притягання є відповідальною за зміну виключеного об'єму в системі. Вважаємо, що така система відліку дозволить сформулювати підхід теорії збурень, який зможе забезпечити дуже точні термодинамічні результати в межах першого порядку теорії збурень. Якщо це так, можливо, вдасться ще більше спростити теорію і використовувати підхід середнього поля для оцінки внеску через слабкі проміжні та далекосяжні взаємодії.

Тверді сфери як системи відліку в статистичній теорії плинів

Основна ідея, на якій базується метод термодинамічної теорії збурень, полягає в тому, що парна міжмолекулярна взаємодія, $u(r)$, може бути розділена на дві частини [1],

$$u(r) = u_0(r) + \Delta u(r) \tag{1}$$

де $u_0(r)$ визначає базисну незбурену систему або систему відліку, а $\Delta u(r)$ відіграє роль збурення. При такому формулюванні проблеми, ступінь подібності структур вихідної u – рідини та u_0 – рідини визначатиме збіжність розвинень теорії збурень. Шлях до термодинамічних властивостей вихідної u-рідини проходить в теорії збурень через розвинення вільної енергії Гельмгольца,

$$\beta F = \beta F_0 - \beta\langle \Delta U \rangle_0 + \ldots = \beta F_0 - 2\pi\beta\rho N \int g_0(r)\Delta u(r) r^2 dr + \ldots = \beta F_0 + N\beta\rho a + \ldots \tag{2}$$

де $\beta = 1/k_B T$, k_B – постійна Больцмана, а T – абсолютна температура, ΔU – внесок взаємодії збурення, $\Delta u(r)$, до повної внутрішньої енергії, $< \ldots >$

позначає канонічне усереднення, N – кількість молекул, ρ – числова густина, $g(r)$ – радіальна функція розподілу, а нижній індекс “0” тут і далі відноситься до системи відліку.

Важливим елементом у термодинамічній теорії збурень є коефіцієнт

$$a = -2\pi \int g_0(r)\Delta u(r) r^2 dr \quad , \tag{3}$$

який описує вклад енергії збурення в термодинамічні властивості системи. За фізичним змістом коефіцієнт a можна ототожнити з молекулярним полем. Залежно від вибору системи відліку, коефіцієнт a може бути: (i) константою; (ii) залежати від густини, або ж (iii) бути залежним від обох цих параметрів – і від густини, і від температури.

Врахування розмірів молекул посередництвом концепції виключеного об’єму та використання твердих сфер для опису вкладу від виключеного об’єму, запропоноване в 1873 році Ван дер Ваальсом [8], майже через століття стало важливим аргументом для використання моделі твердих сфер як системи відліку в теорії збурень Цванціга [1]. Проте цього ще було недостатньо для повноцінного становлення концепції системи відліку, яка передбачала, що задача статистико-механічного опису системи відліку є розв’язаною. Ця важлива частина була зроблена з появою у 1958 році теорії Перкуса-Йевіка для твердих сфер [9]. Ідея ж Ван дер Ваальса стосовно твердих сфер була використана для формулювання концепції визначальної ролі сил відштовхування для структури густих плинів. Ця концепція була остаточно сформульована і стала загальновизнаною в результаті розвитку двох основних підходів теорії збурень, BH [4] та WCA [5]. В результаті, в сучасній теорії плинів є загальноприйнятим, що парну міжчастинкову взаємодію потрібно розділяти на дві складові, якими є енергії відштовхування та притягання.

Разом із цим, якщо повернутися назад до теорії Ван дер Ваальса і уважно перечитати все ним написане [8], то в сухому залишку можна знайти, що основними акцентами Ван дер Ваальса є не енергії відштовхування та притягання, а виключений об’єм та когезія, або ж два тиски – внутрішній та зовнішній. Якщо ж ще й зробити наступний крок і провести деякі обчислення, то можна побачити, що система відліку твердих сфер не завжди (точніше, не для всіх термодинамічних станів) добре відтворює вклад виключеного об’єму вихідного плину, а взаємодії відштовхування та притягання не дають відповіді, що саме Ван дер Ваальс розумів під тиском внутрішнім та тиском зовнішнім. Подібні висновки, правда, дещо в іншій формі були сформульовані і творцями однієї з двох згаданих версій сучасних теорії збурень, а саме, Чандлером, Віксом та Андерсеном в їхній класичні статті в журналі Science [10].

Беручи до уваги вище наведені аргументи, в наших роботах [6,7] запропоновано підхід до вибору системи відліку, який напряму дотримується ідей теорії Ван дер Ваальса. В термінах розділення парної міжчастинкової взаємодії $u(r)$ це можна представити як

$$u(r) = u_0(r) + \Delta u(r) = u_0^{exv}(r) + u^{coh}(r) \quad , \tag{4}$$

тобто взаємодія $u_0^{exv}(r)$, яка визначає систему відліку, означається як така, що є відповідальною за виключений об'єм у вихідній u-системі і за вклад у властивості, зумовлені виключеним об'ємом, а взаємодією збурення $\Delta u(r)$ є енергія когезивної взаємодії $u^{coh}(r)$.

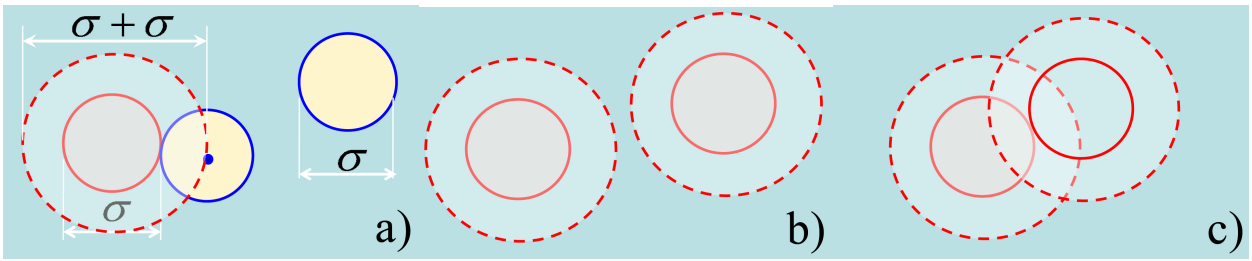


Рис. 1. Виключений об'єм у системі, що складається з твердосферних молекул із діаметром σ, і його залежність від відстані $< r >$ між центрами двох сусідніх молекул.

Для розуміння взаємодій пов'язаних із виключеним об'ємом всієї системи, спочатку коротко нагадаємо про виключений об'єм однієї молекули, $b = v_0 = \frac{2}{3}\pi\sigma^3$ (Рис.1a). Виключений об'єм у випадку двох молекул визначається відстанню між ними (між їхніми центрами). Якщо середня відстань $< r >$ між молекулами велика, а саме, більша, ніж два діаметри σ у випадку твердих сфер, то виключений об'єм системи дорівнює сумі виключених об'ємів кожної з них (Рис.1b), що дійсно так є при малих густинах. При великих густинах, зокрема, коли середня відстань $< r >$ між сусідніми молекулами стає менша, ніж 2σ, уявні оболонки виключених об'ємів починають перекриватись (Рис.1c), в результаті чого виключений об'єм системи вже не дорівнює сумі номінальних виключених об'ємів, а його значення з розрахунку на одну молекулу починає змінюватися, зокрема стає меншим, тобто $b < v_0$.

Оскільки є досить очевидним, що середня міжмолекулярна відстань $< r >$ між сусідніми молекулами є залежною від густини $\rho = N/V$ всієї систем N частинок, то і виключений об'єм v_0 також має бути функцією густини. Природним способом врахування густинної залежності вкладу

виключеного об'єму в тиск, та й інші термодинамічні властивості, є використання відповідних результатів тієї ж теорії Перкуса-Йевіка для системи твердих сфер. Саме такий підхід закладено в основу спершу теорії збурення Цванцігом [1], а пізніше в подібні теоретичні підходи Баркером та Гендерсоном [4], Віксом, Чандлером та Андерсеном [5] та іншими [2].

Хоча це менш очевидно, але середня міжмолекулярна відстань $< r >$ між центрами двох сусідніх молекул також є чутливою і до температури. Така особливість міжмолекулярної відстані є зумовлена енергією короткосяжного притягання, яка разом з енергією відштовхування твердої серцевини визначають повну енергію взаємодії кожної пари молекул. Цей факт вказує на те, що обидві енергії як короткосяжного притягання, так і короткосяжного відштовхування між сусідніми молекулами, повинні бути присутніми у взаємодії u_0^{exv}, яка є відповідальною за виключений об'єм у вихідній u-системі, а значить і визначає відповідну систему відліку.

Система відліку з короткосяжним притяганням

Як і у випадку системи відліку твердих сфер, скориставшись ідеями Цванціга [1], для вільної енергії Гельмгольца отримуємо розвинення, формально ідентичне до попереднього (2),

$$\beta F = \beta F_0^{exv} + 2\pi\beta\rho N \int g_0^{exv}(r) u^{coh}(r) r^2 dr + \ldots = \beta F_0^{exv} - \beta\rho N a^{exv} + \ldots \quad , \qquad (5)$$

яке при врахуванні лише перших двох членів є мікроскопічним узагальненням теорії Ван дер Ваальса на випадок, коли виключений об'єм плину є залежним від густини ρ та температури T .Узагальнення полягає в тому, що як вільна енергія F_0^{exv}, так і радіальна функція розподілу системи відліку $g_0^{exv}(r))$ і, відповідно, коефіцієнт a^{exv}, який означений як

$$a^{exv}(\rho, T) = -2\pi \int g_0^{exv}(r) u^{coh}(r) r^2 dr \quad , \qquad (6)$$

також є функціями густини і температури. А це означає, що взявши до уваги співвідношення

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} \quad , \qquad E = \left(\frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta}\right)_{V,N} \qquad (7)$$

рівняння для ключових термодинамічних властивостей системи, якими є тиск P, внутрішня енергія E, ентропія S та надлишковий хімічний потенціал μ, вже будуть мати загальніший вигляд:

$$\frac{\beta P}{\rho} = \frac{\beta P_0^{exv}}{\rho} - \beta\rho\left[a^{exv}(\rho, T) + \rho\frac{\partial a^{exv}(\rho, T)}{\partial \rho}\right] \quad , \qquad (8)$$

$$\frac{\beta E}{\rho} = \frac{\beta E_0^{exv}}{\rho} - \beta\rho\left[a^{exv}(\rho,T) + \beta\frac{\partial a^{exv}(\rho,T)}{\partial\beta}\right] . \quad (9)$$

Оскільки вільна енергія $F = E - TS$, то ентропія S може бути знайдена з виразу $S = (E - F)/T$, що в результаті дає наступний новий результат для ентропії

$$S(T,V,N) = \frac{E_0^{exv} - F_0^{exv}}{T} - \left(\frac{N\rho}{T}\right)\beta\frac{\partial a^{exv}(\rho,T)}{\partial\beta} . \quad (10)$$

А використовуючи для тиску P та надлишкової вільної енергії, $F - F_0^{exv}$, рівняння (7) та (8) відповідно, надлишковий хімічний потенціал може бути розрахований з рівняння [19]

$$\beta(\mu - \mu_0) = \beta\frac{F - F_0^{exv}}{N} + \frac{\beta P}{\rho} + \ln\rho - 1 = \frac{\beta P_0^{exv}}{\rho} - \beta\rho\left[2a^{exv}(\rho,T) + \rho\frac{\partial a^{exv}(\rho,T)}{\partial\rho}\right] + \ln\rho - 1 \quad (11)$$

Звертаємо увагу, що це є одним із важливих моментів у розвитку концепції системи відліку, який полягає у тому, що вже на етапі побудови теорії отримано нові вирази (8)–(11) для основних термодинмічних величин, які необхідні для розрахунку властивостей вихідної $u-$системи і, зокрема, фазової рівноваги газ-рідина. Новизна отриманих виразів полягає у повноцінному врахуванні густинної та температурної залежностей.

Класичною і найбільш вживаною моделлю простих плинів є однокомпонентна система сферичних частинок із неперервною парною взаємодією Леннарда-Джонса. Проте, з точки зору розвитку теорії і, зокрема, розвитку концепції системи відліку, варто розглянути спочатку модель на основі твердих сфер, тобто з відштовхуванням у вигляді твердої серцевини та з притягальною взаємодією за її межами. Причина в тому, що оскільки в неперервних моделях немає твердої серцевини, то при використанні системи відліку твердих сфер присутня неоднозначність у виборі розміру твердої серцевини σ, тобто появляється додатковий ступінь свободи для параметризації (підгонки) теорії. Навпаки, для моделей «тверді сфери плюс притягання» параметр σ визначається однозначно і такі моделі є ідеальним тестом для нового теоретичного підходу.

У роботах [6,7] ми розглянули твердосферну модель із притяганням Юкави (Y), $-\exp(-zr)/r$, з параметром $z\sigma = 1.8$. Ця модель є твердосферним прототипом класичної моделі Леннарда-Джонса (12-6). У випадку, коли системою відліку є тверді сфери, то все є зрозумілим, і єдиний параметр такої системи – розмір твердих сфер σ є однозначно визначеним. А

саме, він є однаковим як для системи відліку, так і для вихідного твердосферного плину. Коли ж системою відліку є тверді сфери зі взаємодією виключеного об'єму $u_0^{exv}(r)$, то до переліку параметрів додається ще й параметр короткосяжного притягання. А це потребує окремого обговорення. Таке обговорення є в наших роботах [6,7], де як взаємодію $u_0^{exv}(r)$, запропоновано використовувати модель твердих сфер із короткосяжним притяганням у формі потенціалу Юкави $-\exp(-z_0 r)/r$, де z_0 – параметр, який визначає радіус короткосяжного притягання, що є відповідальним за виключений об'єм у системі. Таким чином, на противагу до системи відліку твердих сфер, система відліку виключеного об'єму $u_0^{exv}(r)$ характеризується окрім розміру твердих сфер σ, новим параметром z_0, що характеризує радіус короткосяжного притягання. Якщо взяти до уваги вимогу, що система відліку не має мати фазових переходів в усьому діапазоні термодинамічних станів вихідного плину, то у випадку Леннард-Джонс-подібного юкавівського плину, параметр z_0 може набирати значення $z_0\sigma \geq 4$.

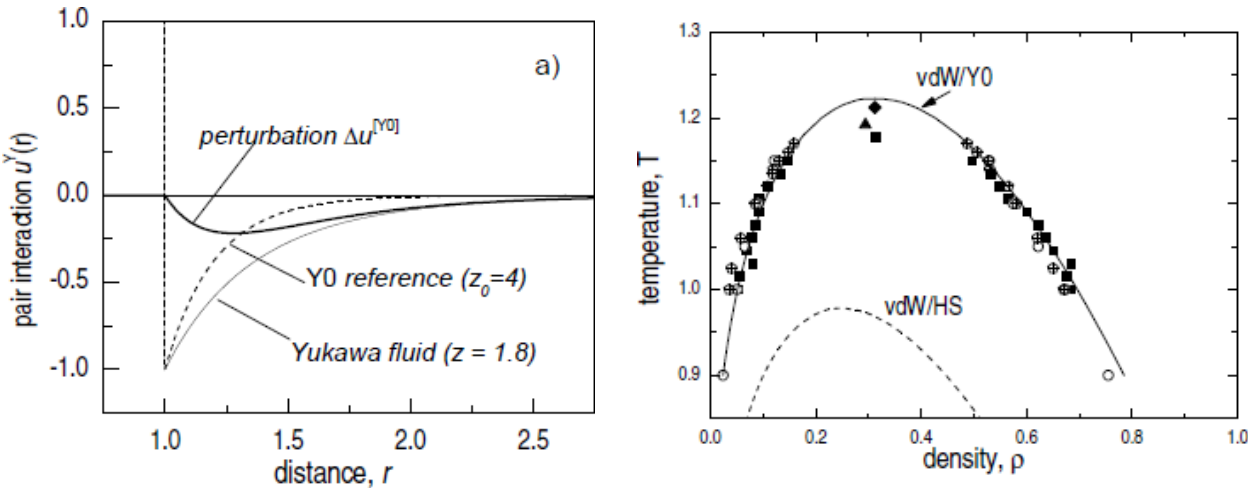


Рис. 2. Ліворуч: міжчастинковий парний потенціал Леннард-Джонс-подібного твердосферного юкавівського плину [12], та поділ його на складові – взаємодію виключеного об'єму $u_0^{exv}(r)$ (пунктирна лінія), та взаємодію когезії $u^{coh}(r)$ (товста суцільна лінія).

На Рис. 2 показано як виглядає розбиття парного міжчастинкового потенціалу Леннард-Джонс-подібного юкавівського плину на дві складові – взаємодію виключеного об'єму, $u_0^{exv}(r)$, та когезійну взаємодію, $u^{coh}(r)$. Ми використали ці дві взаємодії для розрахунку коефіцієнта $a^{exv}(\rho,T)$ та

фазового співіснування для випадку Леннард-Джонс-подібного юкавівського плину.

Результати розрахунку коефіцієнта $a^{exv}(\rho,T)$, отримані для двох різних варіантів системи відліку – твердих сфер та твердих сфер із короткосяжним притяганням Юкави, приведено на Рис. 2. При цьому, Рис. 2 (ліворуч) відповідає випадку, коли виключений об'єм описується в рамках системи відліку твердих сфер, а Рис. 2 (праворуч) відповідає випадку, коли виключений об'єм описується в рамках системи відліку твердих сфер із короткосяжним притяганням Юкави. Розрахунки коефіцієнта $a^{exv}(\rho,T)$ у випадку кожної з цих моделей проводилися шляхом чисельного інтегрування відповідно до означення (6). При цьому, для радіальної функції розподілу системи відліку твердих сфер $g_0^{hs}(r)$ використано аналітичне рівняння [14], тоді як у випадку системи відліку твердих сфер з короткосяжним притяганням Юкави дані для $g_0^{exv}(r)$ отримано методом комп'ютерного експерименту.

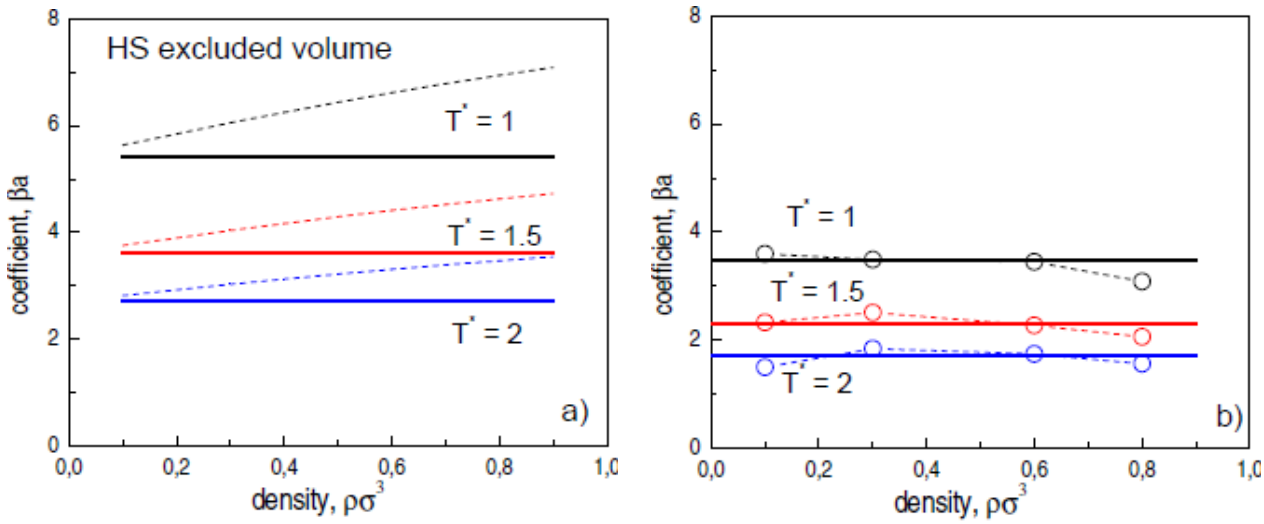


Рис. 3. Коефіцієнт a Леннард-Джонс-подібного юкавівського плину ($z\sigma = 1.8$) як функція густини при трьох температурах [18]. Суцільна лінія відповідає наближенню середнього поля, тоді як пунктирна лінія представляє результати для коефцієнта a, отримані відповідно до означення (6) для системи відліку твердих сфер (ліворуч), та для системи відліку твердих сфер із короткосяжним ($z_0\sigma \geq 4$) притяганням Юкави (праворуч).

Перш за все, величина коефіцієнта a є різною для кожної з моделей системи відліку. Проте, найбільш інтригуюча інформація слідує з аналізу густинної залежності коефіцієнта a в рамках кожної з моделей, але отриманого з різних рівнянь – у наближенні середнього поля та відповідно до рівняння (6). Можна побачити, що у випадку системи відліку твердих сфер,

Рис. 3a, значення коефіцієнта a в наближенні середнього поля (суцільні лінії) як якісно, так і кількісно відрізняється від значення $a^{exv}(\rho,T)$, отриманого в результаті чисельного інтегрування. На противагу цьому, у випадку системи відліку з короткосяжним притяганням, Рис. 3b, можна бачити чітку тенденцію для коефіцієнта a бути дуже подібним для обох розрахунків. Останній результат засвідчує, що: (i) для системи відліку з короткосяжним притяганням коефіцієнт $a^{exv}(\rho,T)$, розрахований відповідно до (6), є дуже подібним до середньо-польового значення; (ii) вклад молекулярного поля слабо залежить від густини, але все ж таки ця залежність існує, і є особливо помітною при великих густинах.

Фазова діаграма співіснування газ-рідина, розрахована при різному виборі системи відліку, приведена на Рис. 2. Для порівняння на цьому рисунку також приведено дані комп'ютерного моделювання методом Монте Карло [16]. Як можна бачити, крива співіснування, отримана з використанням системи відліку твердих сфер, є зміщеною в область значно нижчих температур і суттєво відрізняється від даних комп'ютерного експерименту. В той же час, використання системи відліку твердих сфер зі взаємодією виключеного об'єму приводить як до якісного, так і кількісного відтворення результатів комп'ютерного експерименту. Варто також зазначити, що отримана крива співіснування газ-рідина дає майже таку ж точність, як і другий порядок термодинамічної теорії збурень [12].

Література

1. R. W. Zwanzig, J. *Chem. Phys.* **22** (1954) 1420–1426
2. J.P. Hansen, I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids,* Academic Press, London, 1969.
3. І.Р. Юхновський, М.Ф. Головко, *Статистична теорія класичних рівноважних систем*. Київ, Наукова думка, 1980.
4. J.A. Barker, D. Henderson, *Rev. Mod. Phys*. **48** (1976) 587.
5. H.C. Andersen, D. Chandler, J.D. Weeks, *J. Chem. Phys*. **56** (1972) 3812–1823.
6. R. Melnyk, I. Nezbeda, D. Henderson,A.Trokhymchuk, *Fluid Phase Equil*. 279, 1–10 (2009).
7. R. Melnyk, I. Nezbeda, A. Trokhymchuk, *J. Supercritical Fluids* **55** (2009) 448–454.
8. J.D. van der Waals, *On the continuity of the gaseous and liquid states*. (1873). Edited by J.S. Rowlinson, Elsevier Science Publ., 1988.
9. J.K. Percus, G.J. Yevick, *Phys. Rev. B* **136** (1964) 290.
10. D. Chandler, J.D. Weeks, H.C. Andersen, *Science* **220** (1983) 787–794.

11. J.S. Rowlinson, *Physica* A, **156** (1989) 15–34.
12. D. Henderson, E. Waisman, J.L. Lebowitz, L. Blum, *Mol. Phys*. **35** (1978) 241–255.
13. M. Gonzalez-Melchor, A. Trokhymchuk, J. Alejandre, *J. Chem. Phys*. **115** (2001) 3862–3872.
14. A. Trokhymchuk, I. Nezbeda, J. Jirsak, D. Henderson, *J. Chem. Phys*. **123** (2005) 024501; **124 (**2006), 149902.
15. P.J. Camp, *Phys. Rev. E*, **67** (2003) 011503.
16. K.P. Shukla, *J. Chem. Phys*. **112** (2000) 10358–10367.
17. A. Diez, J. Largo, J.R. Solana, *J. Chem. Phys*. **125** (2006) 074509.
18. A. Trokhymchuk, R. Melnyk, I. Nezbeda, *Cond. Matt. Phys*. **18** (2015) 13501:1-12.
19. D.M. Duh, L. Mier-y-Teran, *Molec. Phys*. **90** (1997) 373.

Динаміка ліпідних мембран та фазові переходи в них

Л.А. Булавін, Д.В. Соловйов
(Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет)

Дослідження присвячене вивченню структури, динаміки та фазових переходів рідинних ліпідних систем, які містять ліпідні мембрани з домішками різної хімічної природи.

У фізиці багатокомпонентних ліпідних систем вважається, що різноманітність функцій, які виконує біологічна мембрана, забезпечується саме за рахунок значної кількості компонент, що входять до її складу. Різноманітні домішки, такі як холестерин, пептиди, йони, кріопротектори та інші, при додаванні їх в ліпідну матрицю змінюють фізичні властивості, фазовий стан та структуру мембрани. Саме тому досить важливо досліджувати механізми взаємодії домішок різної хімічної природи з ліпідною мембраною та вплив цих домішок на структуру, динамічні характеристики та термодинамічні властивості мембран. Найбільш інформативними методами в таких дослідженнях є методи малокутового розсіяння нейтронів та рентгенівського випромінення, що дають інформацію про структурні особливості системи в діапазоні розмірів 1–100 нм. Для визначення термодинамічних параметрів фазових переходів ліпідних рідинних систем слід застосовувати метод диференціальної скануючої калориметрії.

Окремим напрямком дослідження біологічних мембран є процеси фазового поділу та утворення ліпідних доменів. Саме за рахунок фазового

поділу в клітинних мембранах створюються умови для локалізації та функціонування мембранних білків, які існують в кожній клітині. Вважається, що вказані процеси відбуваються за рахунок теплових коливань ліпідних молекул, які входять до складу мембрани. Тому дослідження колективних коливань ліпідних молекул може допомогти зрозуміти механізми фазового поділу. Зазначимо, що метод непружного розсіяння рентгенівського випромінення є одним із найефективніших методів для дослідження колективної динаміки молекул в пікосекундному масштабі часу. Його використання дозволяє експериментально визначити не тільки енергію колективних коливань ліпідних молекул, а й виявити всі можливі моди таких коливань.

Окрім фундаментального значення дослідження ліпідних мембран існують також прикладні аспекти застосування результатів таких досліджень, зокрема в медицині та фармакології. Так, зміна властивостей ліпідних мембран може зумовлювати виникнення важких захворювань, таких як хвороба Альцгеймера, окремі види цукрового діабету та інші. Зазначимо, що ліпідні мембрани широко використовуються як біосумісні капсули, за допомогою яких відбувається адресна доставка ліків в організмі людини.

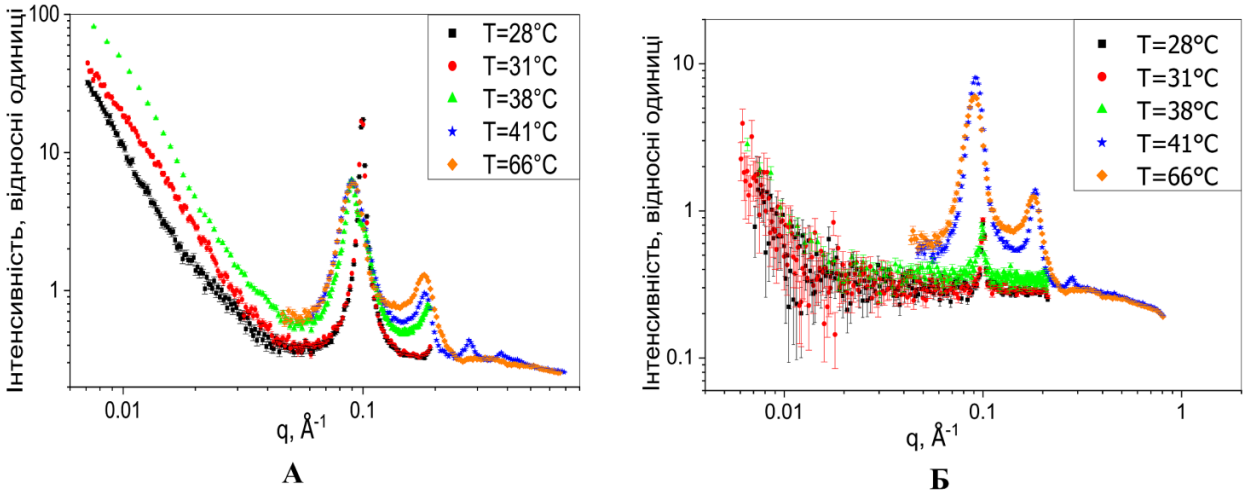


Рис. 1. Криві малокутового розсіяння рентгенівського випромінення системою вода–дипальмітоїлфосфатидилхолін–нітрат срібла при різних температурах: 28 °C (чорні квадрати), 31 °C (червоні круги), 38 °C (зелені трикутники), 41 °C (сині зірки), 66 °C (помаранчеві ромби). Концентрація нітрату срібла складає 10% (А) та 30% (Б).

Відповідно, було визначено структурні, динамічні та термодинамічні властивості водних ліпідних систем, що містять домішки різної хімічної природи, виявлено особливості фазових переходів у таких системах,

досліджено процеси фазового поділу в багатокомпонентних ліпідних мембранах.

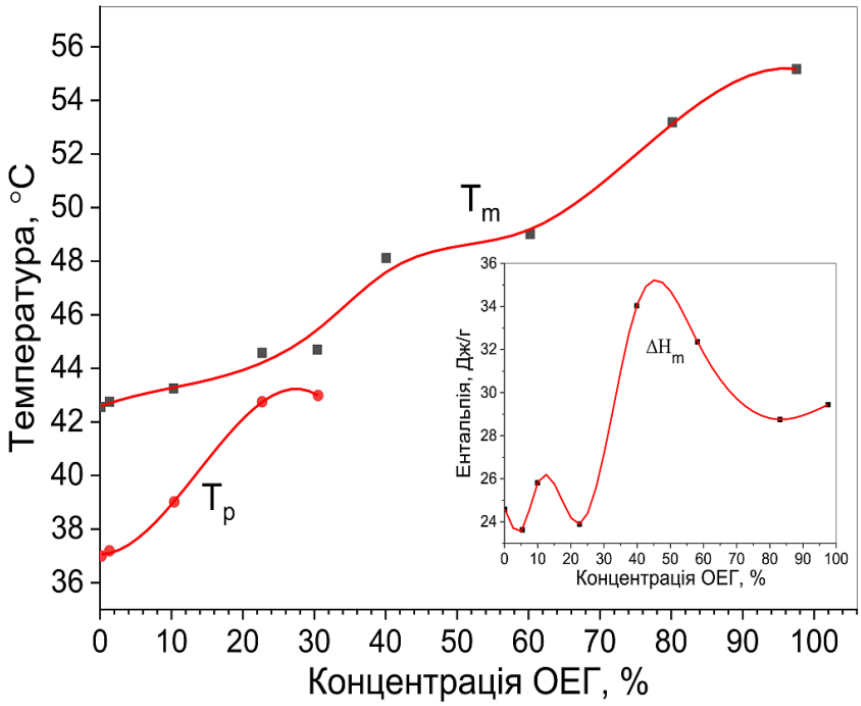


Рис. 2. Залежність температур передплавлення (червоні круги) та головного фазового переходу (чорні квадрати) в системі вода–ДПФХ від концентрації оксиетиленгліколю. На вставці показана залежність ентальпії головного фазового переходу від концентрації оксиетиленгліколю.

Зокрема, досліджено вплив мембранотропних домішок абсолютно різних хімічних класів на властивості ліпідної мембрани: її температуру плавлення, фазовий стан, товщину, електростатичний потенціал ліпідних голів та багато інших параметрів. Важливість подібних досліджень важко переоцінити, адже біологічна мембрана кожної клітини містить сотні різноманітних компонентів, які необхідні для повноцінного функціонування клітини. По суті ліпіди слугують матрицею для різноманітних рецепторів, іонних каналів, мембранних білків, які знаходяться всередині мембрани. Змінюючи фазовий стан мембрани, можна активувати або деактивувати ту чи іншу функцію кожної компоненти. Також, зменшуючи товщину ліпідного бішару за допомогою відповідних мембранотропних домішок, можна взагалі прибрати певну мембранну компоненту з конкретної ділянки мембрани.

Зрозуміло, що зміна концентрації деяких мембранотропних домішок, наприклад гліцерину, діє аналогічно зміні температури або тиску. Оскільки життєдіяльність багатьох живих організмів відбувається в досить невеликому температурному діапазоні, то регулювання концентрації мембранотропних

домішок залишається чи не єдиним способом змінювати фазовий стан ліпідної мембрани, залишаючи її при цьому в комфортних температурних умовах.

Окрім забезпечення сприятливих умов функціонування мембранних білків, сам ліпідний бішар виконує дуже важливу функцію – забезпечує пасивний транспорт речовин крізь клітинну мембрану. Існуючі дослідження показали, що ліпідні молекули, коливаючись всередині бішару, збираються в локальні нанорозмірні домени, навколо яких утворюються пори, що і забезпечує проходження речовин крізь мембрану. Причому вказані пори утворюються виключно в рідкокристалічній фазі ліпіду. Час життя таких доменів та пор складає декілька пікосекунд. Тому, додаючи ту чи іншу мембранотропну домішку в ліпідну мембрану, можна регулювати не тільки функції мембранних білків, а й закривати або відкривати пори.

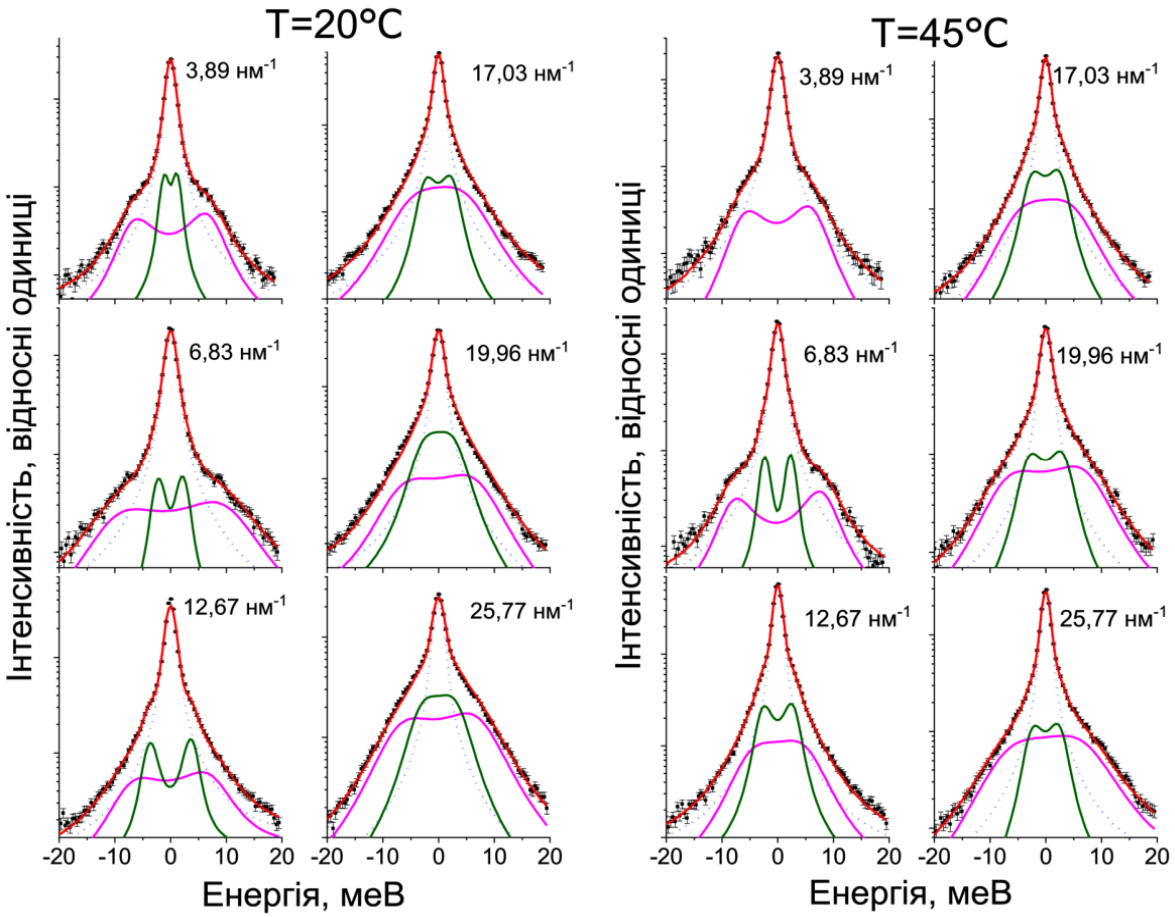


Рис. 3. Спектри непружного розсіяння рентгенівського випромінення на орієнтованих ліпідних бішарах ДПФХ при температурах 20°C та 45°C.

Цей результат може бути корисним у фармакології, адже ліпідні везикули є одним із найперспективніших засобів адресної доставки лікарських препаратів у задану частину організму. В такий спосіб можна імобілізувати ліки всередині ліпідної везикули, молекули якої знаходяться в

гель фазі, та доставити везикулу до потрібного місця. Потім, за рахунок додавання певних домішок, змінити фазу ліпіду на рідкокристалічну, тим самим стимулювати спонтанне виникнення нанорозмірних пор, через які ліки зможуть виходити із везикули.

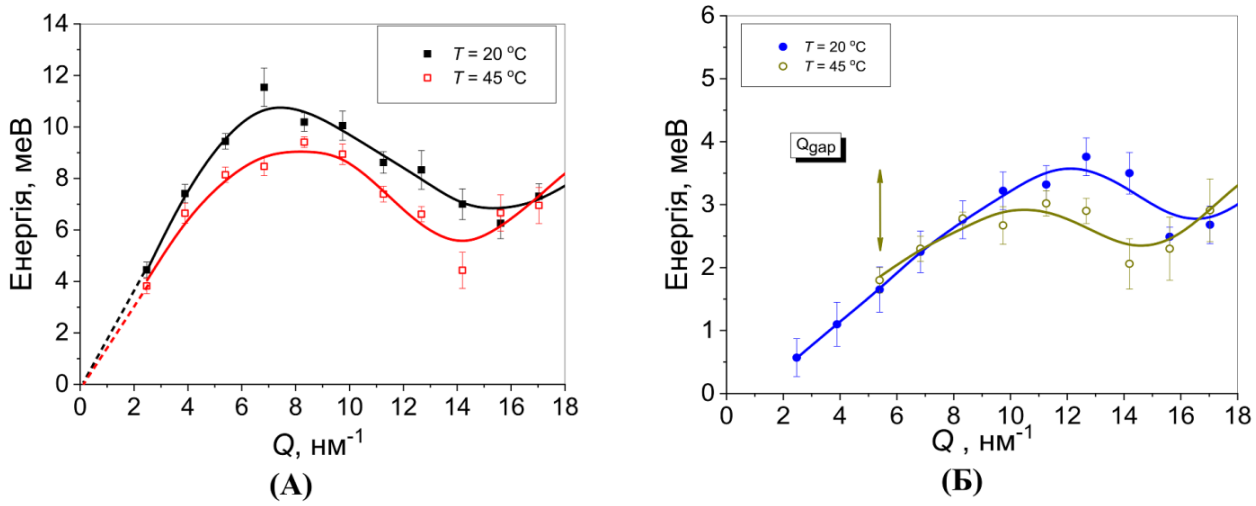


Рис. 4. Дисперсійні криві поздовжніх (А) та поперечних (Б) фононних мод у ліпідних мембранах ДПФХ при температурах 20 °С та 45 °С.

Методом непружного розсіяння рентгенівського випромінення проведено вимірювання динаміки орієнтованих ліпідних мембран дипальмітоїлфосфатидилхолін (ДПФХ). За результатами експерименту побудовано дисперсійні криві акустичних коливань в площині мембрани. Вперше експериментально показано існування поперечних фононних коливань у ліпідній мембрані ДПФХ. Доведено, що в рідкокристалічній фазі ДПФХ розповсюдження поперечних акустичних коливань при малих значеннях вектора переданого імпульсу не відбувається. Це пов’язано з процесами дифузії і релаксації, що відбуваються в ліпідній мембрані. Згідно з фононною теорією рідин, поперечне розповсюдження фононів на великі відстані неможливе через зменшення щільності ліпідної упаковки. Це явище є свідченням існування короткочасного (на пікосекундному масштабі часу) локального впорядкування молекул у ліпідних мембранах.

На основі отриманих експериментальних даних запропоновано гіпотезу, яка передбачає, що термічно спричинене виникнення короткочасно живучих пор у ліпідній мембрані відіграє важливу роль у дифузії розчинених речовини крізь неї.

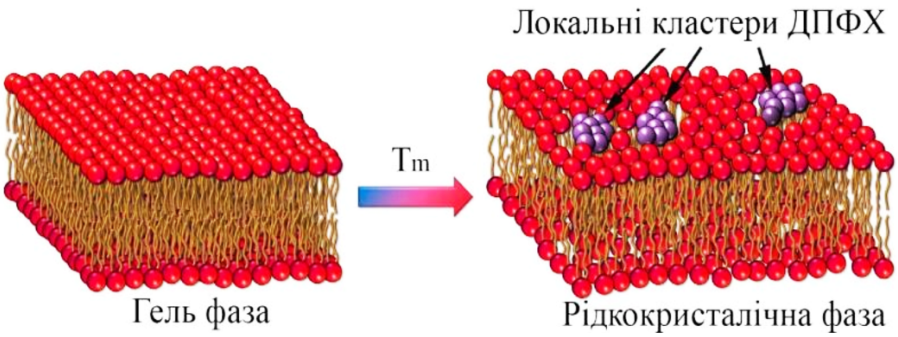


Рис. 5. Спонтанне утворення короткоживучих кластерів у рідкокристалічній фазі ліпіду.

Використання методу непружного розсіяння рентгенівського випромінення високої роздільної здатності (синхротронного випромінювання) дозволило виконати прямі експериментальні вимірювання колективних коливань молекул у двокомпонентній ліпідній системі ДПФХ–холестерин при різних температурах та концентраціях холестерину. Вперше експериментально доведено існування оптичної фононної моди в подвійній ліпідній системі, а також у нематичній фазі рідких кристалів 4-циано-4'-пентилбіфенілу (5CB), що має структуру, схожу на структуру ліпідної мембрани. Показано, що оптична фононна мода виникає внаслідок протифазних коливань пар зв'язаних молекул ДПФХ та холестерину, та існує у всіх фазах подвійної ліпідної системи, окрім так званої твердої орієнтованої, яка за своєю структурою близька до гель фази ДПФХ. Виявлено, що оптична мода коливань має розрив, який зумовлений ефектом скінченного розміру області, де такі коливання існують. Факт існування оптичної фононної моди та розриву на ній підтверджений результатами комп'ютерного моделювання методом молекулярної динаміки. Енергія оптичної фононної моди, визначена з даних непружного розсіяння рентгенівського випромінення, знаходиться в межах проведених теоретичних розрахунків.

Експериментально доведено, що розмір області існування оптичної моди не залежить від концентрації холестерину та температури ліпідної системи. Це є прямим доказом існування стійких структурних одиниць у ліпідній мембрані – стабільних ліпідних комплексів, які мають розмір ~0,9 нм, що відповідає розміру декількох пар молекул ДПФХ–холестерин. На основі отриманих даних запропоновано гіпотезу формування ліпідних доменів (рафтів), які утворюються при фазовому поділі. В рамках цієї гіпотези кожен ліпідний домен, утворений в результаті фазового поділу, складається з певної кількості стабільних ліпідних комплексів. При цьому, час життя домену визначається коефіцієнтом дифузії молекул у площині мембрани та, зазвичай, не перевищує декількох сотень мікросекунд. Запропонований підхід пояснює існуючу в літературі відмінність у

визначенні розмірів ліпідних доменів (5 нм – 200 нм). Розмір кожного конкретного домена визначається концентрацією та розподілом стабільних ліпідних комплексів, що входять до його складу. Фактично, окремий ліпідний комплекс є найменшим доменом, що може утворитися в багатокомпонентній мембрані за рахунок фазового поділу.

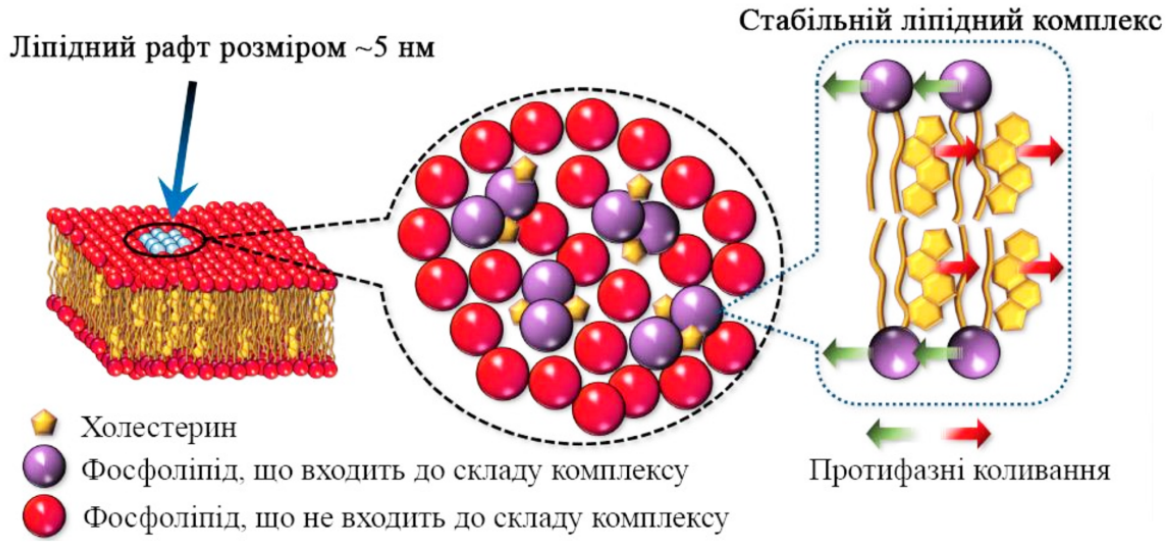


Рис. 6. Ліпідний комплекс, як елементарна одиниця ліпідного домену, утвореного в результаті фазового поділу.

За допомогою методу непружного розсіяння рентгенівського випромінення високою роздільної здатності проведено вимірювання потрійних ліпідних систем, до складу яких входив насичений фосфоліпід (ДПФХ), ненасичений фосфоліпід (диолеїлфосфатидилхолін (ДОФХ) або пальмітоїлолеїлфосфатидилхолін (ПОФХ)) та холестерин у різних фазових станах. Результати експериментальних досліджень вказали на відсутність оптичної фононної моди в області існування невпорядкованої L_d фази при температурах 25°C та 45°C, так само як і у впорядкованій L_o фазі при температурі 45°C. З метою підтвердження того, що L_o фаза при нагріванні переходить в L_d фазу потрібно проведення додаткових експериментів із використанням структурних методів дослідження.

Аналіз експериментальних даних вказує на існування оптичної фононної моди за умови присутності рідкої впорядкованої фази L_o при температурі 25 °C, як окремо, так і в суміші з рідкою невпорядкованою фазою L_d. В рамках запропонованої раніше гіпотези формування ліпідних доменів при фазовому поділі існування оптичної моди пов’язане з наявністю в мембрані стабільних ліпідних комплексів, кожен із яких складається з 2–3 ліпідних пар. При цьому наявність ненасиченого ліпіду в мембрані приводить

до зменшення розміру таких комплексів порівняно з подвійною ліпідною системою ДПФХ–холестерин. Крім того, при збільшенні кількості компонент мембрани можливе збільшення кількості варіантів ліпідних пар, кожна з яких характеризуватиметься своєю енергією міжмолекулярної взаємодії.

Представлені результати дають підстави стверджувати, що запропонована гіпотеза формування ліпідних доменів у подвійній системі ДПФХ–холестерин працює також і в більш складних (за кількістю компонент) системах, але з урахуванням можливого збільшення кількості варіантів ліпідних пар, які можуть бути утворені в мембрані.

За допомогою методу флеш фотолізу проведено дослідження фотоциклу мембранного білка бактеріородопсину в діапазоні температур (10 ÷ 40) °C в залежності від концентрації холестерину в мембрані. Для цього була створена установка флеш фотолізу, що дозволяє вимірювати залежність пропускання світла різних довжин хвиль через зразок у широкому діапазоні часу з роздільною здатністю не менше 50 нс.

Показано, що відсутність холестерину в мембрані ДПФХ суттєво сповільнює фотоцикл бактеріородопсину, що пов’язано з різницею в товщині мембрани та гідрофобної частини бактеріородопсину. Незважаючи на те, що холестерин не є природнім компонентом бактеріальних мембран, його додавання в мембрану ДПФХ призводить до прискорення фотоциклу за рахунок розташування доменів навколо білка.

Одержані експериментальні результати пояснюють особливості процесів пасивного транспорту речовин крізь ліпідну мембрану та надають прямі докази існування стабільних ліпідних комплексів, що є основною структурною одиницею доменів, утворених в результаті фазового поділу. Знайдено, що формування доменів у багатокомпонентних ліпідних мембранах за участю холестерину ймовірно відбувається за рахунок поєднання стабільних ліпідних комплексів. Виявлено кореляції між швидкістю фотоциклу мембранного білка бактеріородопсину та концентрацією холестерину в мембрані. Показано, що за рахунок додавання певних мембранотропних домішок у водну ліпідну систему можливо виготовити мембрану з наперед заданими структурними параметрами та фазовим станом.

Отримані за допомогою використання методу малокутового розсіяння рентгенівського випромінення та диференціальної скануючої калориметрії результати є суттєвими для створення систем адресної доставки лікарських препаратів на основі ліпідних систем.

Дослідження динамічних та структурних властивостей мембрани дипальмітоїл-фосфатидилхоліну є надзвичайно важливим, оскільки цей ліпід є основною складовою легеневої поверхнево–активної речовини в організмі, через яку проникає кисень. Крім того, проведені дослідження дисперсійних фононних кривих в одно- та багатокомпонентних модельних мембранах

дозволили описати процеси переносу крізь них речовин та теплової енергії. Це відкриває шлях до вивчення процесів, які відбуваються в реальних біологічних мембранах, компонентний склад яких є більш різноманітним.

Література

1. Zhernenkov, M., D. Bolmatov, D. Soloviov, K. Zhernenkov, B.P. Toperverg, A. Cunsolo, A. Bosak, and Y.Q. Cai, Revealing the mechanism of passive transport in lipid bilayers via phonon-mediated nanometre-scale density fluctuations. *Nature Communications*, 2016. 7 Art.no. 11575.
2. Bulavin, L., N. Kutsevol, V. Chumachenko, D. Soloviov, A. Kuklin, and A. Marynin, SAXS Combined with UV-vis Spectroscopy and QELS: Accurate Characterization of Silver Sols Synthesized in Polymer Matrices. *Nanoscale Research Letters*, 2016. 11(1): p. 1–8.
3. Krasnikova, A.O., N.A. Kasian, O.V. Vashchenko, L.N. Lisetski, A.M. Kompaniets, A.V. Zinchenko, D.V. Soloviov, and L.A. Bulavin, Effect of Oxyethilated Glycerol Cryoprotectants on DPPC Model Lipid Membranes Structure and Phase. *Problems of Cryobiology and Cryomedicine*, 2015. 25(2): p. 186.
4. Bulavin, L.A., D.V. Soloviov, A.I. Kuklin, L.N. Lisetski, N.A. Kasian, A.O. Krasnikova, O.V. Vashchenko, and A.V. Zinchenko, Small-angle X-ray scattering and differential scanning calorimetry studies of DPPC multilamellar structures containing membranotropic agents of different chemical nature. *Ukrainian Journal of Physics*, 2015. 60(9): p. 905–909.
5. Bulavin, L.A., D.V. Soloviov, V.I. Gordeliy, O.S. Svechnikova, A.O. Krasnikova, N.A. Kasian, O.V. Vashchenko, and L.N. Lisetski, Lyotropic model membrane structures of hydrated DPPC: DSC and small-angle X-ray scattering studies of phase transitions in the presence of membranotropic agents. *Phase Transitions*, 2015. 88(6): p. 582–592.
6. Soloviov, D., Y. Zabashta, L. Bulavin, O. Ivankov, V. Gordeliy, and A. Kuklin, Changes in the Area per Lipid Molecule by P–V–T and SANS Investigations. Macromolecular Symposia, 2014. 335(1): p. 58–61.

Мікронеоднорідність структури металевих розплавів

С. І. Мудрий, І. І. Штаблавий
(Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет)

Структура рідин не завжди є такою ідеальною як кристалічних твердих тіл. Руйнування дального порядку в розміщенні атомів у кристалах після плавлення супроводжується багатьма змінами атомного розподілу і, перш за все, в межах найближчих сусідів, що в свою чергу впливає на фізико-хімічні властивості. Зокрема, це проявляється у вигляді аномалій на температурних залежностях густини, в'язкості, електропровідності та інших характеристик. Вказувані структурні особливості часто проявляються і на термодинамічних властивостях та вказують на існування мікронеоднорідностей у структурі ближнього порядку. Такі мікронеоднорідності виявляються в існуванні груп атомів мікро- та наномасштабного рівня, атомний розподіл в яких суттєво відрізняється. Крайніми випадками такої мікронеоднорідності є наявність мікро- та макророзшарування. Як відомо, з термодинамічної точки зору мікро- та макророзшарування може бути пояснене більшими значеннями енергії взаємодії між атомами одного типу та слабшою взаємодією різносортних атомів. Проте, в багатьох випадках не враховано ентропійного фактора при формуванні сплавів із розшаруванням.

На жаль, дотепер немає достатньо обґрунтованих пояснень механізму формування мікро- та макрогетерогенних систем, не кажучи вже про деталі їхньої атомної будови та фізичних властивостей.

Зважаючи на те, що нагрівання таких сплавів набагато вище температури існування негомогенності веде до переходу систем із незмішуванням компонент сплаву в квазіоднорідний стан, виникає питання про атомний механізм такого перетворення, який повинен відбуватися шляхом інтенсивних дифузійних процесів. Подібні явища, очевидно, будуть спостерігатися і при охолодженні сплавів і переході до неоднорідного стану. Відомо, що процеси дифузії в рідкому стані можна пояснити меншою густиною рідини порівняно з кристалами та, відповідно, наявності більшої частки незайнятого атомами об'єму. Тому вивчення атомної структури таких сплавів з одночасним аналізом розподілу вільного об'єму може дати відповідь на ще нез'ясовані питання.

Методика експерименту

Структура розплавів досліджувалася за допомогою високотемпературного рентґенівського дифрактометра, який давав змогу отриму-

вати криві інтенсивності дифрагованого випромінювання при різних температурах до 1400 К. Зразок розміщувався в камері дифрактометра, заповненій гелієм, для запобігання його окисненню. Геометрія розміщення вхідної щілини рентґенівського променя, монохроматизованого за допомогою кристала LiF, центра камери і вхідної щілини лічильника відповідала схемі фокусування типу Бреґґ–Брентано [1]. Точність вимірювання інтенсивності випромінювання була в межах 2–3% і залежала від вибраного часу експозиції в кожній точці. Температура вимірювалася й підтримувалася з точністю ±2 К.

Отримані експериментальні кутові залежності інтенсивності дифрагованого випромінювання усереднювалися методом найменших квадратів, а після цього вводилися поправки на поляризацію, поглинання й аномальну дисперсію. Приведення до електронних одиниць здійснювалося за допомогою методу, описаного в [2]. Виправлені і пронормовані криві інтенсивності використовувалися для розрахунку структурних факторів (СФ), парних кореляційних функцій (ПКФ) та функцій радіального розподілу атомів. Ці функції дали змогу обчислювати основні параметри ближнього порядку: r_1 – найбільш імовірну міжатомну відстань та Z – кількість найближчих сусідів. Аналізувався також профіль структурного фактора, визначалися положення його основного максимуму k_1 та висота $S(k_1)$.

Для більш детального дослідження проводилася реконструкція структури розплавів оберненим методом Монте-Карло (RMC). Для процесу моделювання створювалася кубічна комірка, яка містила 10000 атомів. Розміри модельної комірки були вибрані відповідно до густини розплаву при температурі експерименту. Мінімально можливі відстані між атомами R_{ij} приймали як точку перетину лівої вітки першого максимуму експериментальної ПКФ з віссю абсцис. В результаті отримано парціальні парні кореляційні функції, за допомогою яких визначалися парціальні міжатомні відстані та парціальні координаційні числа.

Результати та їх обговорення

Результати дослідження структури сплавів системи Bi-Zn, які наявні в літературі, стосуються, головно, інтервалу концентрацій, який охоплює область незмішування в рідкому стані [3–5]. В цих роботах показано, що основні максимуми структурних факторів та парних кореляційних функцій можна отримати простим додаванням відповідних максимумів для чистих компонент. Результати термодинамічних досліджень показують наявність значного максимуму концентраційної залежності ентальпії змішування та мінімуму ентропії сплавів в околі існування області розшарування [6–8]. З іншого боку в цих роботах менше уваги звернено на області евтектичних та біляевтектичних сплавів системи Bi-Zn, які мають широке практичне

застосування. Аналогічні екстремуми існують також і на експериментальних концентраційних залежностей інших фізичних величин [9–11].

На рис. 1 наведено структурні фактори розплавів системи Bi-Zn біляевтектичних концентрацій, отримані при температурі на 5К вищій лінії ліквідус. Характерною рисою всіх СФ є наявність напливу на правій вітці його основного максимуму. Цей наплив зазвичай пояснюють збереженням у рідкому стані певної частки ковалентних зв'язків у вигляді короткочасної локалізації валентних електронів у зв'язаному стані між парами або групами сусідніх атомів. Іншою причиною наявності напливу першого максимуму може бути вплив мікрообластей цинку на процес розсіяння рентгенівського випромінювання, що веде до адитивного накладання кривої інтенсивності цинку на аналогічну криву бісмуту. Подібний висновок було зроблено в роботі [12], де вказується на значний ступінь сегрегації в сплавах системи Bi-Zn.

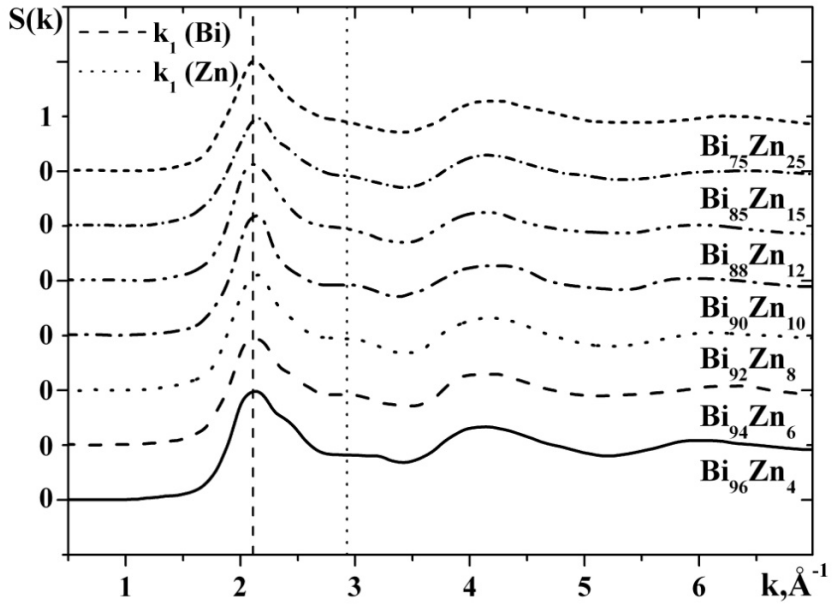


Рис. 1. Структурні фактори біля евтектичних сплавів системи Bi-Zn при температурі T_L+5K.

Сегрегація в сплавах системи Bi-Zn або іншими словами формування областей із переважаючим сусідством атомів одного типу вносить свій вклад у температурні та концентраційні залежності основних структурних параметрів.

Результати модельної оцінки концентраційних залежностей міжатомних відстаней [13] вказують на те, що модель статистичного роз–поділу атомів задовільно описує експериментальні результати при вмісті цинку менше 6 ат.%, а подальше збільшення концентрації цинку веде до

відхилення значень міжатомних відстаней від модельних значень. Вказана тенденція зберігається і при вищих температурах (рис. 2).

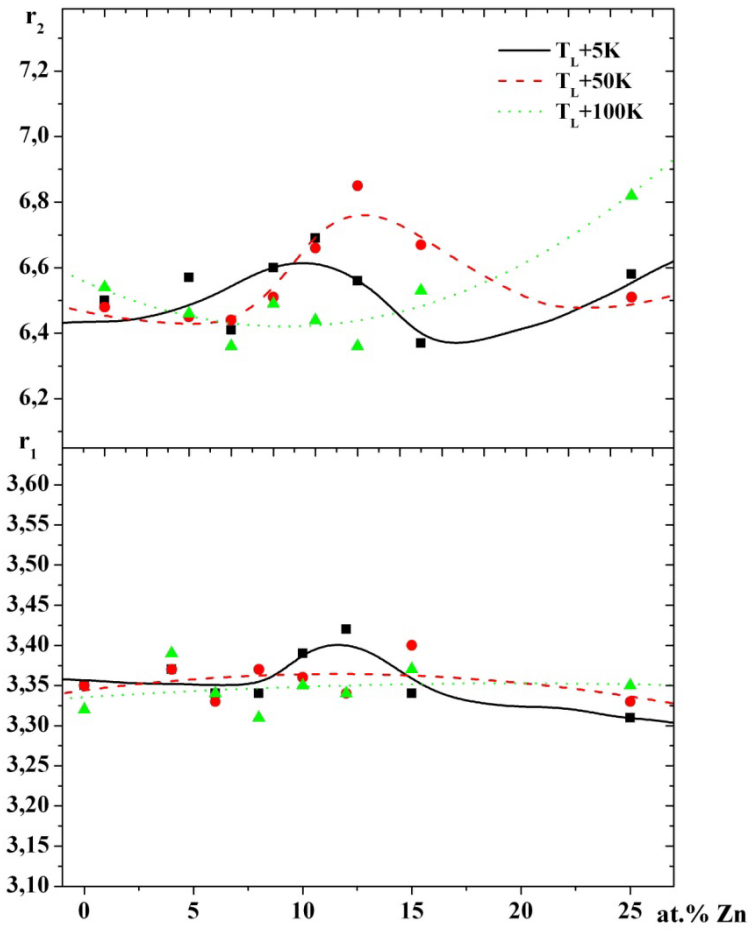


Рис. 2. Концентраційні залежності найбільш імовірних відстаней в першій та другій координаційних сферах для сплавів системи $Bi_{100-x}Zn_x$ в біляевтектичній області концентрацій.

Описані нами варіації міжатомних відстаней узгоджуються з видом діаграми стану Bi-Zn, яка свідчить про значно більшу розчинність цинку в бісмуті, ніж бісмуту в цинку. Очевидно, вирішальним фактором у цьому випадку є велика різниця атомних радіусів бісмуту та цинку (r_1^{Bi}=1,6Å, r_1^{Zn}=1,38Å), що вказує на те, що топологічні характеристики структури ближнього порядку не сприяють утворенню розчину зі статистичним розподілом атомів.

Для сплавів системи $Bi_{100-x}Zn_x$ було проведено реконструкцію атомної структури оберненим методом Монте-Карло.

Атомні конфігурації, отримані навіть для випадку малих концентрацій цинку, вказують на тенденцію до асоціації атомів різного типу (рис. 3). Зі збільшенням концентрації цинку вказана тенденція проявляється більш виражено. Іншою особливістю атомної структури досліджуваних сплавів є те, що атоми цинку намагаються утворити не симетричні кластери в матриці бісмуту, а формують ланцюжки, довжина яких залежить від вмісту цинку. Такий принцип формування структури, очевидно, зумовлений значною відмінністю атомних радіусів бісмуту та цинку, а утворення ланцюжків цинку веде до зростання щільності упаковки.

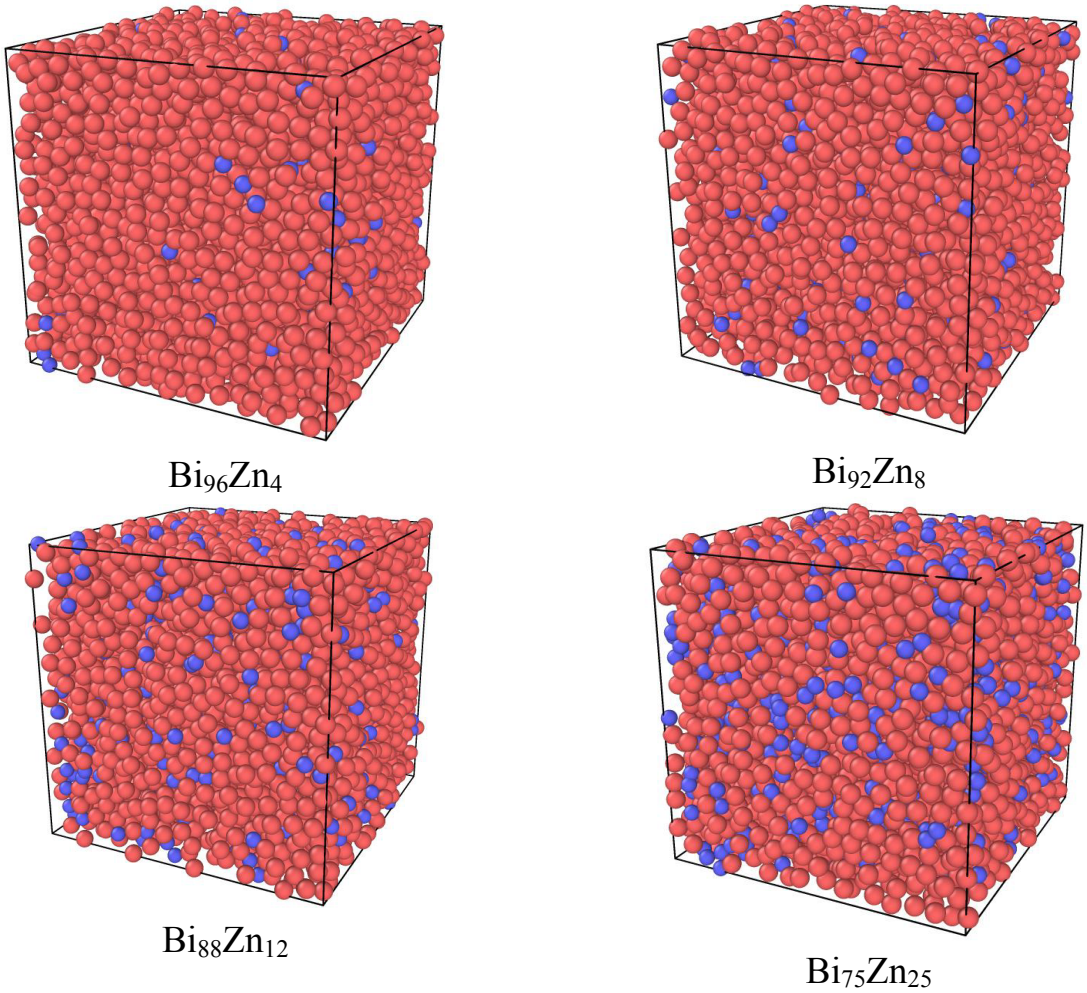


Рис. 3. Конфігурація атомів у модельній комірці розплавів системи $Bi_{100-x}Zn_x$ для деяких концентрацій компонент сплаву.

Кількісно кореляцію в розміщенні атомів можна описати за допомогою парціальних парних кореляційних функцій (рис. 4). Розподіл парціальних координаційних чисел також свідчить про більшу ступінь кореляції між атомами бісмуту та парами атомів бісмут-цинк порівняно з атомами цинку (рис. 4). Збільшення вмісту цинку веде до зменшення найбільш імовірних

значень координаційних чисел Z_{Bi-Bi} та Z_{Bi-Zn} та збільшення координаційних чисел Z_{Zn-Zn}. Проте, навіть при вмісті цинку 25 атомних відсотків найбільш імовірне значення координаційного числа Z_{Zn-Zn} дорівнює двом, що підтверджує формування ланцюжків атомів цинку в матриці бісмуту. Такі зміни ведуть до формування щільнішої структури завдяки меншому радіусу атомів цинку і, відповідно, до зменшення вільного об'єму.

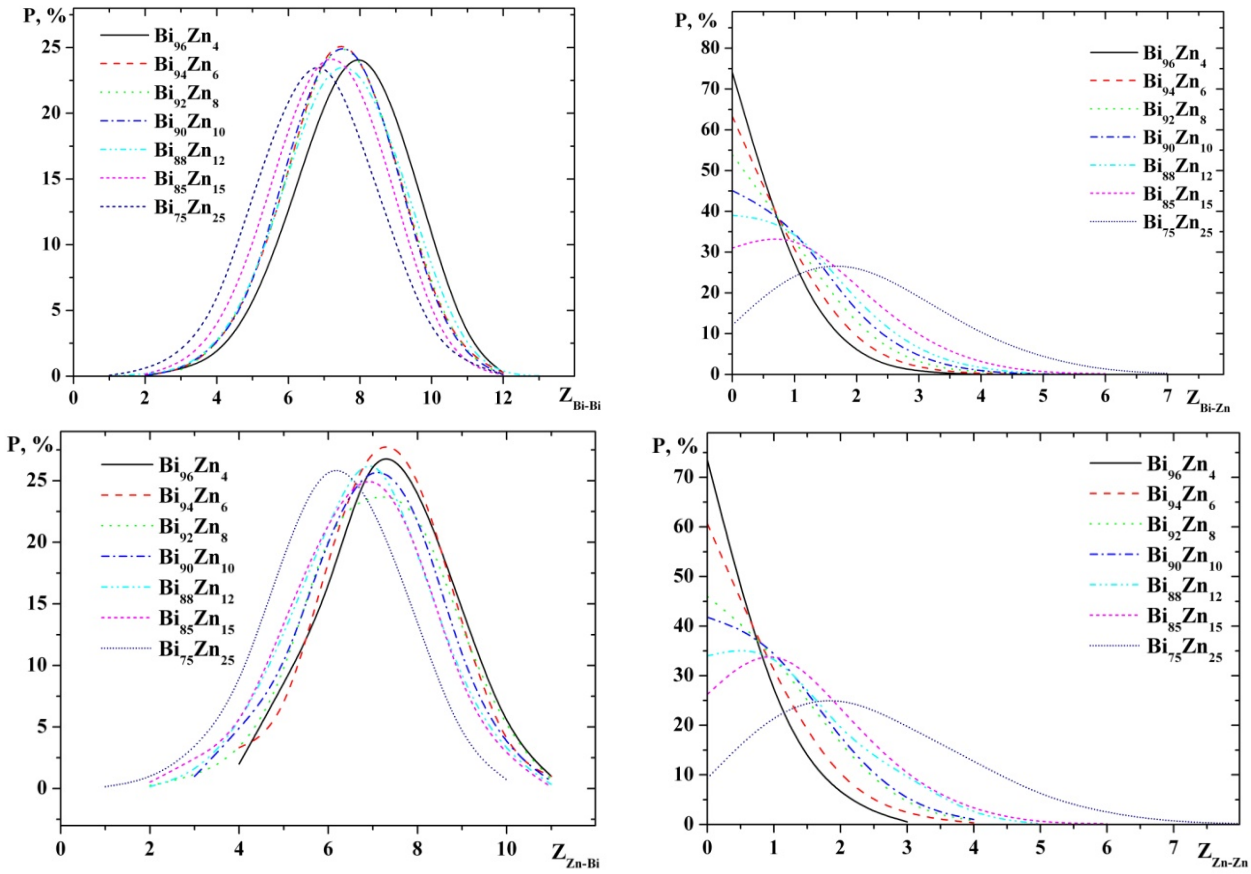


Рис. 4. Розподіл парціальних координаційних чисел розплавів системи $Bi_{100-x}Zn_x$.

Більша тенденція до розшарування та сегрегації атомів характерна для розплавів системи Bi – Ga. Основними особливостями цієї системи є абсолютна нерозчинність компонентів у твердому стані та обмежена у рідкому, що виражається наявністю широкої концентраційної та температурної області незмішуваності в рідкій фазі. Дослідження таких систем у рідкій фазі важливі для розуміння механізму утворення області незмішування на мікроскопічному рівні та зв'язку цього механізму зі структурними змінами. Особливо це стосується сплавів, які за вмістом компонент відповідають положенню максимуму бінодалі.

Результати дослідження структури та вільного об'єму розплавів $Bi_{1-x}Ga_x$, а також літературні дані щодо в'язкості розплавів [14] вказують на найбільшу ступінь флуктуацій в інтервалі концентрацій від 50 ат. % до 90 ат. % Ga, що узгоджується з результатами дифракційних досліджень. У цій роботі зроблено висновок про те, що значне збільшення в'язкості в межах інтервалу, що відповідає області незмішуваності, повинно бути пов'язане з великими розмірами структурних одиниць Ga-Ga та Bi-Bi. Зважаючи на це, детальніше було проаналізовано форму першого максимуму структурних факторів. Беручи до уваги асиметричний профіль основних максимумів СФ для рідких сплавів, а також для Ga та Bi, здійснено апроксимацію цих максимумів в адитивному припущенні. Результат такої апроксимації для розплаву, що містить 70 ат. % Ga, показаний на рис. 5. Як видно, основний максимум структурного фактора можна отримати як суму двох симетричних піків у припущенні існування в розплаві Bi- і Ga-подібних кластерів.

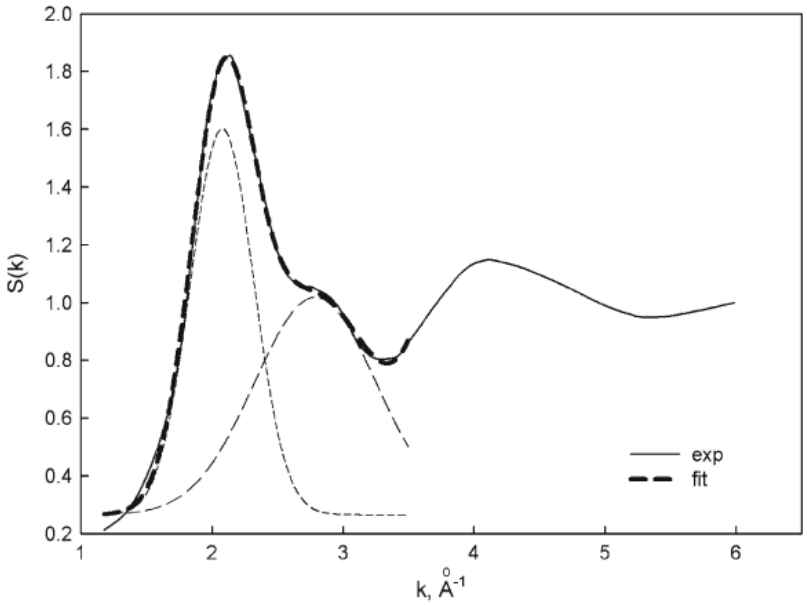


Рис. 5. Комп'ютерна апроксимація першого максимуму для рідкого сплаву $Bi_{30}Ga_{70}$.

Припускаємо, що перший із них відповідає металевим кластерам, а другий – кластерам із ковалентним типом зв'язку. Розрахувавши розмір цих кластерів, встановлено, що металеві кластери зі структурою типу Ga мають більший розмір, ніж кластери Bi. Для цього сплаву також проведено більш детальні дослідження структури при різних температурах в інтервалі 543–843 K.

На рис. 6 наведено структурні фактори розплаву $Ga_{0,7}Bi_{0,3}$ при різних температурах. Перший пік структурних факторів має широкий асиметричний профіль, що пояснюється незалежним накладанням дифракційних максимумів компонент сплаву, які знаходяться при 2,2 Å^{-1} для бісмуту та 2,5 Å^{-1} для

галію. З правого боку головного максимуму, навіть при перегріві розплаву на 250 К вище куполу розчинності, зберігається побічний наплив, який відповідає положенню такого ж напливу структурного фактора рідкого галію. Такий профіль структурних факторів є результатом адитивного накладання СФ розплавів компонент сплаву. Зростання температури веде до згладження плеча структурних факторів і зменшення висоти головного максимуму, що, безумовно, вказує на зменшення середньої атомної густини за рахунок теплового розширення і до збільшення статистичного розподілу атомів даного розплаву.

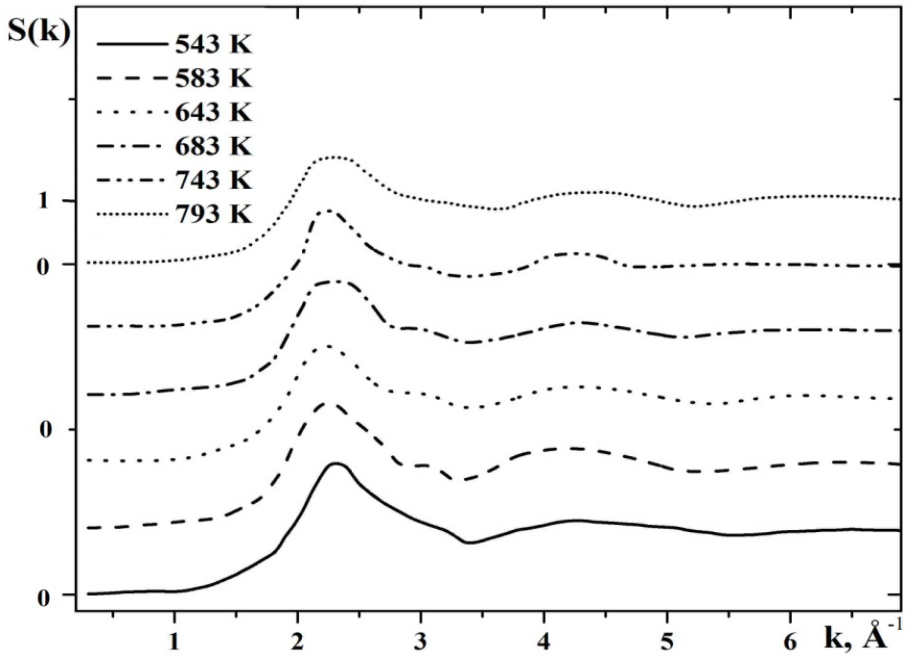
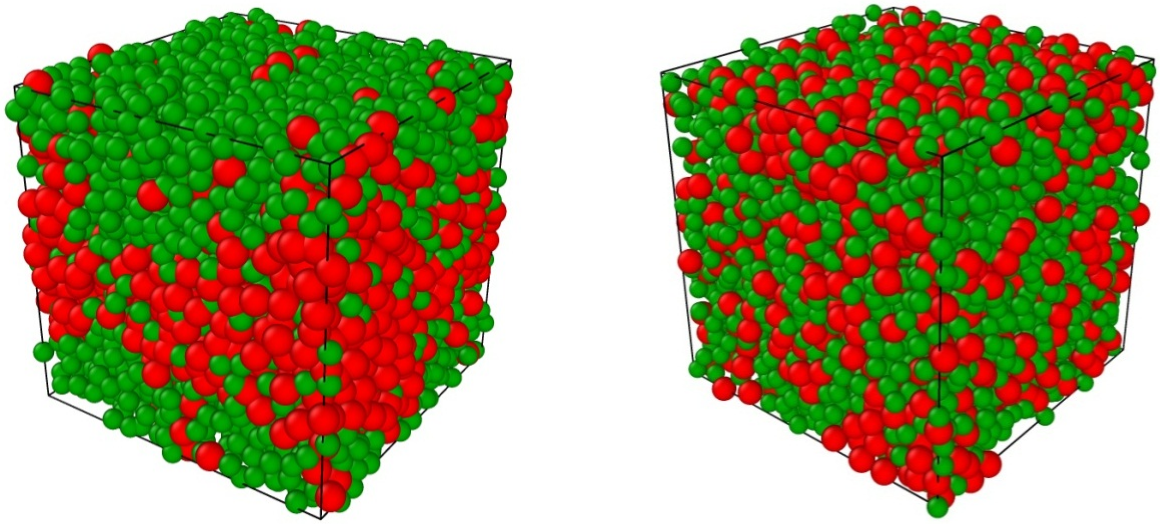


Рис. 6. Структурні фактори розплавів $Ga_{0,7}Bi_{0,3}$ при різних температурах.

Для більш детального аналізу структурних перетворень під час нагрівання розплаву $Ga_{0,7}Bi_{0,3}$ було використано обернений метод Монте-Карло. В результаті реконструкції структури отримано розподіл атомів у модельованій комірці (рис. 7), використовуючи який, розраховано та проаналізовано парціальні міжатомні відстані (рис. 8) та координаційні числа (рис. 9).

На рис. 7 видно тенденцію до сегрегації атомів одного типу в сплаві $Ga_{0,7}Bi_{0,3}$ при температурі, близькій до критичної точки. Таке впорядкування атомів добре описується моделлю самоасоціації [15] для рідких сплавів, яка демонструє позитивні відхилення їх властивостей від закону Рауля. Перегрів до температури 250 К вище критичної точки не призводить до повної гомогенізації розплаву, що може бути викликано як розмірним фактором, так і термодинамічними умовами. Отримані результати узгоджуються з результатами роботи [16], де вказується, що в подібному сплаві з

незмішуванням Ga – Pb потрібно приблизно 50 годин, щоб стати повністю однорідним при температурі, близькій до критичної точки.



(а) (б)

Рис. 7. Розподіл атомів у модельній комірці для розплаву $Ga_{0,7}Bi_{0,3}$: (а) T = 543 K, (б) T = 793 K.

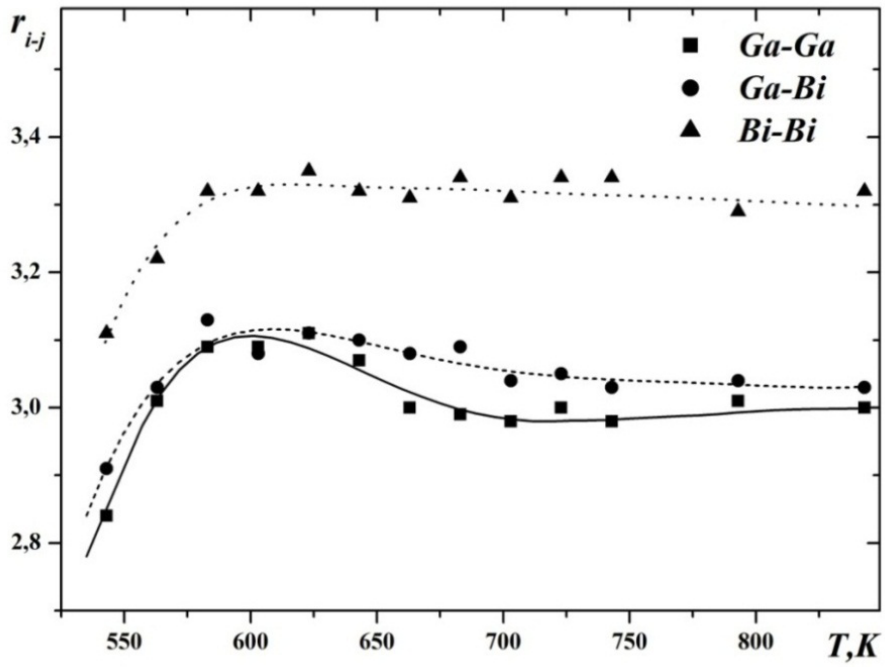


Рис. 8. Температурна залежність парціальних найбільш імовірних міжатомних відстаней сплаву $Ga_{0,7}Bi_{0,3}$.

Температурні залежності основних парціальних структурних параметрів (міжатомні відстані та координаційні числа) (рис. 8 та 9) свідчать про те, що основні процеси, пов'язані з гомогенізацією розплаву, відбуваються в діапазоні температур 100 К вище критичної точки. На стадії гомогенізації спостерігається збільшення міжатомних відстаней, що сприяє збільшенню дифузійної рухливості атомів і, відповідно, самого процесу змішування. Збільшення температури призводить до зменшення координаційних чисел атомів одного типу та їх збільшення для різних типів атомів. Зокрема, координаційні числа $Z_{Ga\text{-}Bi}$ збільшуються з 2,5 до 4, а $Z_{Bi\text{-}Ga}$ збільшуються з 5,5 приблизно до 10. Це вказує на можливість існування в розплаві трьох типів атомних угруповань, а саме двох на основі чистих компонент, а також гетерокоординованих областей, де атоми бісмуту в основному оточені галієм. Наше припущення узгоджується з емульсійною моделлю [17], згідно з якою для подвійної системи АВ після плавлення вона не переходить в однорідний розчин, а складається з трьох рідких фаз: диспергованих дрібних частинок на основі компонентів сплаву А та В і перехідних оболонок на межі розділу. В результаті нагрівання розплав переходить із мікронеоднорідного стану в однорідний, що впливає на зміну основних структурних параметрів. Вказані структурні перетворення також впливають на зміну вільного об'єму при нагріванні.

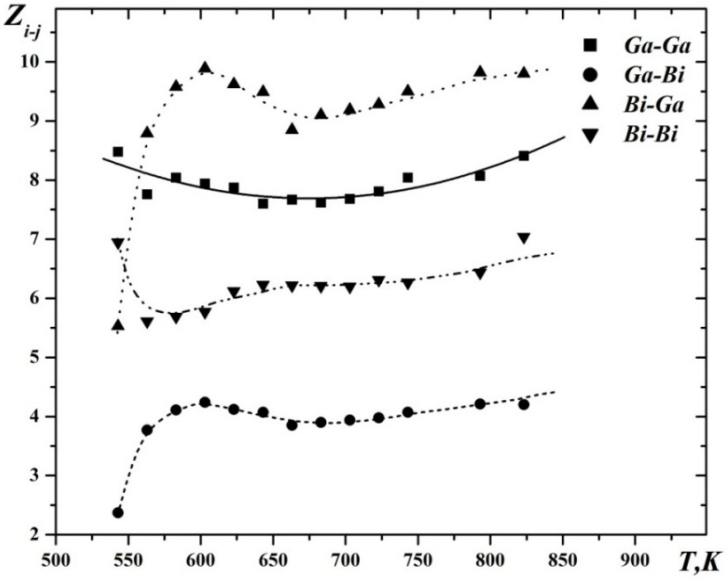


Рис.9. Залежність парціальних координаційних чисел розплаву $Ga_{0,7}Bi_{0,3}$ від температури.

На відміну від систем із переважаючою взаємодією атомів одного типу в металевих розплавах, для яких у кристалічному стані характерна наявність інтерметалічних сполук, спостерігається формування асоціатів зі структурою,

подібною до структури в кристалічному стані. Серед досліджуваних нами сплавів найбільш виразно ця особливість простежується для розплавів системи Sn-Co.

Структуру розплавів Sn-Co нами було досліджено у широкому діапазоні концентрацій при температурі 1473 К, яка є близькою до температури плавлення компонента з найвищою температурою плавлення. У цьому випадку очікується наявність у розплавах структурних одиниць з хімічним ближнім порядком. Таким чином, на основі експериментальних результатів та модельних розрахунків вивчено зміни складу основних структурних одиниць при різних концентраціях сплавів.

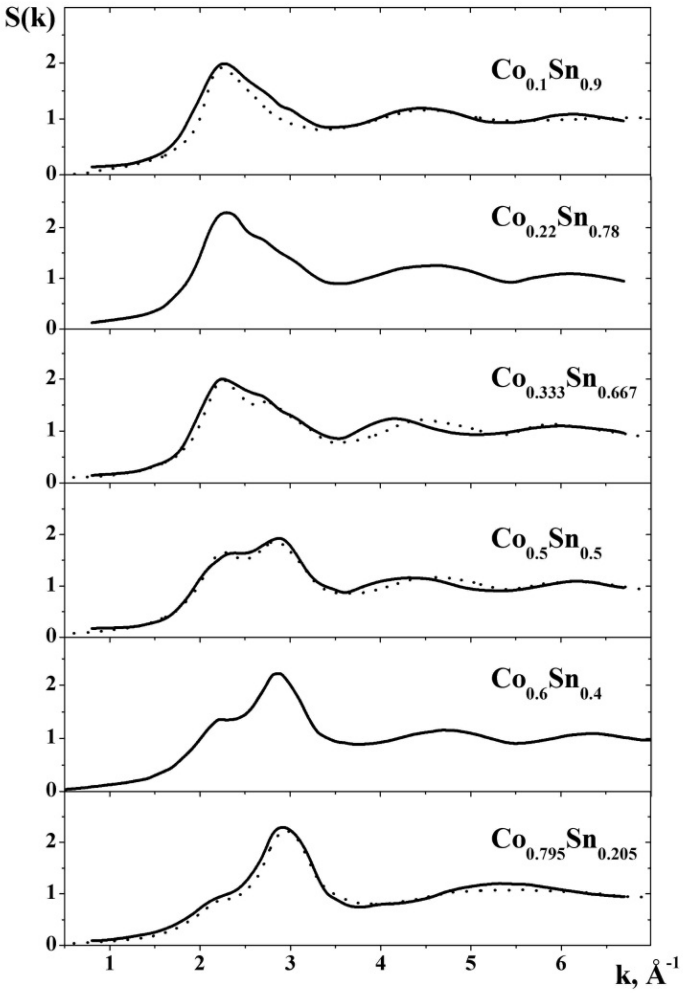


Рис. 10. Структурні фактори для рідких сплавів Sn-Co.

Експериментальні СФ для рідких сплавів $Sn_{100-x}Co_x$ з різним вмістом кобальту мають нетиповий для простих рідин профіль (рис. 10). Зокрема, головний пік є низьким, широким і виявляє тонку структуру порівняно з СФ компонентів. Внаслідок існування кількох інтерметалічних сполук атомна

структура сплавів Sn-Co в межах ближнього порядку повинна суттєво залежати від концентрації компонентів як у твердому, так і в рідкому стані, що, очевидно, спостерігається в СФ при різному вмісті компонентів.

Розщеплення широкого основного максимуму СФ рідких сплавів Sn-Co на два підмаксимуми при деяких концентраціях є одним із підтверджень складної структури досліджуваних сплавів. Перший підмаксимум відповідає основному максимуму СФ рідкого Sn, тоді як другий відповідає положенню основного максимуму СФ для рідкого кобальту. У цьому випадку структуру ближнього порядку в рідких сплавах Sn-Co неможливо описати статистичним розподілом атомів, і, швидше за все, можна трактувати як суміш різного роду структурних одиниць у рідкому стані.

Враховуючи існування хімічних сполук у досліджуваній системі та враховуючи екзотермічну поведінку інтегральної ентальпії змішування з точкою мінімуму близько 60 ат.% Co [18], можна припустити існування комплексів (кластерів) з подібним хімічним впорядкуванням в рідкому стані. Слід також зазначити, що серед усіх існуючих сполук лише сполука Co_3Sn_2 плавиться конгруентно і є найбільш стабільною сполукою в системі. Як випливає зі структурних досліджень таких сполук, хімічне впорядкування зберігається при плавленні. Тому можна припустити, що ця сполука впливатиме на структуру сплавів Sn-Co у рідкому стані. Відповідно, сплав, який відповідає сполуці Co_3Sn_2, ділить фазову діаграму на дві частини. Перша частина − це діаграма евтектичного типу, а друга − евтектичного типу з фазами, які плавляться неконгруентно. Таким чином, ми розглядаємо структуру досліджуваних рідких сплавів відповідно до згаданої особливості фазової діаграми.

Рідкий сплав $Co_{79.5}Sn_{20.5}$ відповідає евтектичному складу, який у кристалічному стані складається з чистого кобальту та фази Co_3Sn_2. Відповідно до самоасоційованої моделі розплавів рідка евтектика складається з кластерів зі структурою, що відповідає фазам, утвореним згідно евтектичної реакції $L \rightarrow Co + Co_3Sn_2$. Згідно з роботою [19] у рідкому сплаві $Co_{79.5}Sn_{20.5}$ у діапазоні температур 1423-1623 K існують кластери типу β-Co_3Sn_2 та β-Co. Тому нами порівняно структурні фактори рідких сплавів $Co_{50}Sn_{50}$, $Co_{60}Sn_{40}$ та $Co_{79.5}Sn_{20.5}$ з дифракційною картиною кристалічної сполуки Co_3Sn_2 (рис. 11). Як видно з цього рисунка, є добре узгодження між положеннями першого максимуму структурних факторів та дифракційними максимумами сполуки Co_3Sn_2. Це дозволило припустити, що хімічно впорядковані одиниці зі структурою, близькою до сполуки Co_3Sn_2, впливають на структуру розплавів в усьому досліджуваному діапазоні концентрацій.

Для підтвердження гіпотези про утворення груп (кластерів) хімічного впорядкування типу Co_3Sn_2 у розплавах Co-Sn розраховано структурні фактори розплавів у рамках моделі незалежного розсіювання. Згідно з цією

моделлю інтенсивність розсіювання рентгенівських променів сплавом дорівнює зваженій сумі розсіяних інтенсивностей компонентів сплаву

$$I_a = c_1 I_1 + c_2 I_2, \tag{1}$$

де I_a, I_1 та I_2 – інтенсивності розсіювання рентгенівських променів; c_1, c_2 – концентрація компонентів сплаву. Використовуючи це співвідношення, можна розрахувати структурні фактори сплаву:

$$S(k) = c_1 K_1^2 S_1(k) + c_2 K_2^2 S_2(k), \tag{2}$$

де $K_1^2 = \dfrac{F_1^2(k)}{c_1 F_1^2(k) + c_2 F_2^2(k)}$, $K_2^2 = \dfrac{F_2^2(k)}{c_1 F_1^2(k) + c_2 F_2^2(k)}$ – розсіювальні здатності компонентів сплаву; F_1, F_2 – коефіцієнти атомного розсіювання.

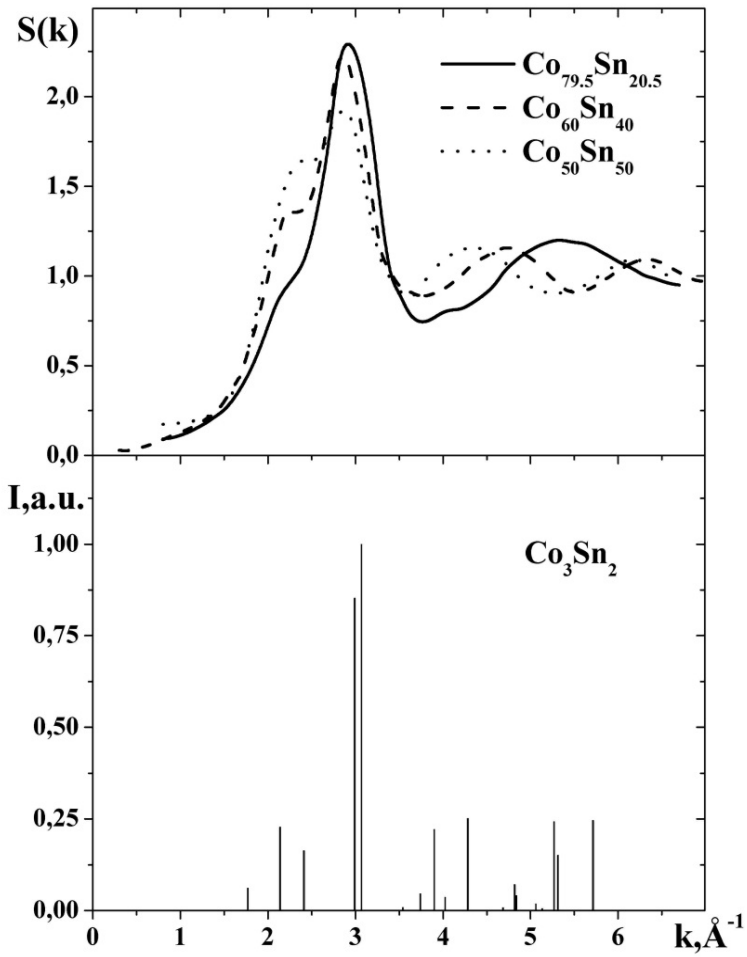


Рис. 11. Структурні фактори для рідких сплавів $Co_{50}Sn_{50}$, $Co_{60}Sn_{40}$ та $Co_{79.5}Sn_{20.5}$ та дифракційна картина для кристалічної сполуки Co_3Sn_2.

Результати розрахунків показані на рис. 10. Розрахунки проводилися, виходячи з того, що структура розплавів, що містять менше 40 ат.% олова, формується на основі кластерів кобальту та областей хімічного впорядкування типу Co_3Sn_2. На структуру сплавів із більшим вмістом олова, очевидно, впливають хімічно впорядковані кластери Co_3Sn_2 та розчин зі складом $Co_{22.3}Sn_{77.7}$ для розплавів $Co_{50}Sn_{50}$ або $Co_{33.3}Sn_{67.7}$, а також кластери на основі Sn для рідкого сплаву $Co_{10}Sn_{90}$.

Відповідно до рис. 10 розраховані криві добре узгоджуються з експериментальними даними. Слід зазначити, що розрахована крива для евтектичного сплаву добре узгоджується з експериментальним структурним фактором, припускаючи вищу розчинність Co в структурних одиницях типу Co_3Sn_2 порівняно з кристалічним інтерметалідом. Ця розчинність досягає значень близько 70 ат.%, що є близьким до складу Co_2Sn. Це припущення випливає з того факту, що стехіометричний діапазон сполуки Co_3Sn_2 розширюється і зміщується в сторону кобальту на фазовій діаграмі при наближенні до точки плавлення. Розрахунок інших структурних факторів ґрунтувався на припущенні, що склад кластерів типу Co_3Sn_2 відповідає стехіометрії $Co_{0.6}Sn_{0.4}$. На підставі доброго узгодження експериментальних СФ з розрахунковими припущено, що структура рідких сплавів у широкому досліджуваному діапазоні концентрацій може бути представлена як суміш двох типів кластерів, склад та відносний вміст яких наведені в табл. 1.

Таблиця. 1. Кластерний склад рідких сплавів Co-Sn в рамках моделі незалежного розсіювання.

Кластери / Сплави	Co	Co_3Sn_2	$Co_{22.3}Sn_{77.7}$	Sn
$Co_{79.5}Sn_{20.5}$	0.6	0.4	–	–
$Co_{50}Sn_{50}$	–	0.74	0.26	–
$Co_{33.3}Sn_{67.7}$	–	0.7	0.3	–
$Co_{10}Sn_{90}$	–	–	0.04	0.96

Висновки

В результаті проведених досліджень показано, що мікронеоднорідність структури металевих розплавів, яка обумовлена різною енергетикою міжатомної взаємодії, існує в широкому концентраційному та температурному інтервалах.

Для розплавів системи Bi-Zn встановлено атомарне розчинення цинку в бісмуті, коли вміст цинку є меншим шести атомних відсотків. В області біляевтектичних концентрацій цинк розчиняється в матриці на основі бісмуту у вигляді комплексів, які складаються з двох-трьох атомів. При вмісті цинку більше 12 відсотків відбувається формування довших ланцюжків з атомів цинку, які вже не можуть входити в мікрообласті на основі бісмуту і тому формують окремі структурні одиниці в міжкластерній області бісмуту.

Встановлено сегрегацію атомного розподілу розплавів системи Bi-Ga, що зумовлено існуванням двох типів кластерів: металевих кластерів зі структурою типу Ga, які мають більший розмір, та кластери зі структурою бісмуту меншого розміру. Показано, що наявність великих міжатомних відстаней у розплавах Bi-Ga за різного вмісту галію є свідченням великих флуктуацій концентрації у цих розплавах.

Показано, що розміщення атомів у розплавах Co-Sn в широкому діапазоні концентрацій можна описати в рамках моделі незалежного розсіювання. Згідно з цією моделлю структура розплавів, що містять менше 40 ат.% олова, формується кластерами кобальту та хімічно впорядкованих областей типу Co_3Sn_2. На структуру сплавів із більшим вмістом олова впливають хімічно впорядковані кластери Co_3Sn_2 та розчин зі складом $Co_{22.3}Sn_{77.7}$ для розплавів $Co_{50}Sn_{50}$ або $Co_{33.3}Sn_{67.7}$, а також кластери олова для рідкого сплаву $Co_{10}Sn_{90}$.

Література

1. V. K. Pecharsky, P. Y. Zavalij, Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials (Springer, 2008).
2. Cromer D. T. Scattering Factors Computed from Relativistic Dirac-Slater Wave Functions. / D. T. Cromer, J. T. Waber // Acta Crystallogr. 18(5), 104 (1965).
3. Tamaki S. Structure of liquid Bi-Zn alloys with miscibility gaps/ S. Tamaki, S. Takeda, S. Harada, Y. Waseda, E. Matsubara // J. Phys. Soc. Jpn. – 1986. – 55. – 4296–4301.
4. Knoll W. Structure of Molten Bi-Zn-AIloys by Means of Neutron Diffraction / W. Knoll, P. Lamparter, S. Steeb // Z. Naturforsch. – 1983. − 38a. − P 395–398.
5. Fluctuations in medium-range structure of Bi-based metallic liquid alloys / H Ueno, Y Kawakita, K Ohara et al. // Journal of Physics: Conference Series. – 2012. – 340. – 012081.

6. Kasem Md. Riad A systematic study of segregation for Zn_xBi_{1-x} liquid binary alloys / Md. Riad Kasem, G. M. Bhuiyan, and Md. Helal Uddin Maruf // J. Chem. Phys. – 2015. – 143. – P. 034503
7. Sung S. Kim Thermodynamic assessment of the miscibility gaps and the metastable liquidi in the Zn–Bi, Zn–Pb, and Zn–Tl systems / Sung S. Kim, Thomas H. Sanders // Z. Metallkd. – 2003. – 94. – P. 390–395
8. Djaballah Y. Thermodynamic assessment of the binary system (Bi–Zn) / Y Djaballah, L Bennour, F Bouharkat and A Belgacem-Bouzida // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2005. – 13. – P. 361–369.
9. Mudry S. Viscosity of Bi–Zn liquid alloys / S. Mudry, Yu. Plevachuk, V. Sklyarchuk, A. Yakymovych // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2008. – 354. – P. 4415–4417.
10. Peng Jia et al., Liquid structure feature of Zn–Bi alloys with resistivity and viscosity methods / Peng Jia, Haoran Geng, Yijun Ding et al. // Journal of Molecular Liquids. 2016. – 214. – P. 70–76.
11. Магомедов А. М. Электросопротивление расплавов Zn-Sn и Zn-Bi / А. М. Магомедов // Теплофизика высоких температур. – 1978. – Т. 16. – С. 526–530.
12. Karlhuber S. Direct measurement of the concentration fluctuations in liquid Bi–Zn alloys / S. Karlhuber, A. Mikula, R.N. Singh, F. Sommer // Journal of Alloys and Compounds. – 1999. – 283. – P. 198–202.
13. Mudry S. I. Structure of near-eutectic Bi–Zn liquid alloys / S. I. Mudry and I. M. Shevernoga // Inorganic Materials. – 2012. – 48. − P 735–738.
14. Viscosity, resistivity, and structural changes of $Bi_{60}Ga_{40}$ alloy melt with liquid-liquid phase separation / Wang M, Geng H, Li Z, et al. // Rev Adv Mater Sci. – 2013,33. – P. 311–315.
15. Singh R.N. Simple model for demixing binary liquid alloys / R.N. Singh, F. Sommer // Z Metall. – 1992. − 83(7). – P. 553.
16. Investigation of the miscibility gap region in liquid Ga – Pb alloys / Plevachuk Y, Filippov V, Kononenko V, et al. // Z Metall. – 2003. − 94(9). – P. 1034–1039.
17. Zhukova L. A. Melts microheterogeneity in binary metallic systems having eutectic and monotectic transformations / L. A. Zhukova, O. P. Aksyonova, A. A.Zhukov // J Phys Conf Ser. – 2008. − 98(3). – P. 032015.
18. Enthalpy of mixing of liquid Co-Sn alloys / A. Yakymovych, S. Furtauer, A. Elmahfoudi et.al. // J Chem Thermodyn. – 2014. – V. 74. – P. 269–285.

19. Lilova K. Thermochemical and topological studies of systems constituted by transition metals (Co, Ni) with Sn and Bi. Nancy, France: Université Henri Poincaré; 2007.

Теоретичні підходи до моделювання колективних властивостей білків

Андрій Баумкетнер
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Вступ

Білки це один із чотирьох основних типів біологічних молекул. Значний науковий інтерес до цих систем обумовлений стрімким прогресом у генетиці [1], завдяки якому на сьогодні вже опубліковані геноми понад тисячі людей [2, 3]. Хоча амінокислотні послідовності багатьох тисяч білків є відомими, їхня структура залишаться погано зрозумілою. Експериментальні підходи до вирішення цієї задачі – відомої як проблема згортання білків, є повільними та достатньо коштовними. Як наслідок, великого значення набули теоретичні методи, які використовують методи комп'ютерного моделювання [4]. За останні роки встановлення структури білків теоретичними засобами досягло рівня точності кристалографічних досліджень [5].

Крім структури, ключовими характеристиками білка в його природному середовищі є взаємодії з іншими біологічними молекулами. В результаті цих взаємодій білки набувають певної колективної поведінки. В цьому огляді висвітлено прогрес у дослідженнях двох проявів колективної поведінки: a) фазового переходу типу рідина-рідина в розчинах білків та b) утворення білкових кластерів, які є важливими як у біологічному контексті, так і з точки зору використання білків у різноманітних технологічних процесах.

Фазове розшарування в розчинах білків

Із часу опублікування перших повідомлень про розшарування рідина-рідина у водних розчинах білка пройшло понад 40 років [6]. Тим не менш, зацікавленість до цього явища залишається незмінно високою. Розуміння того, як метастабільна рідинна фаза спонтанно виникає з розрідженої газоподібної фази при охолодженні, є важливим у багатьох областях наукових досліджень, включаючи: кристалографію білка [7], де рідка фаза вважається проміжною в критичній області фазового переходу кристалізації,

медичні дослідження [8], де рідка фаза асоціюється з виникненням холодної катаракти, та біологію [9], де вважається, що утворення крапель рідини лежить в основі механізму, за допомогою якого в цитоплазмі живих клітин описуються такі немембранні утворення, як ядерця або центросоми.

На сьогодні серед дослідників існує консенсус [10, 11], що перехід у рідиноподібну фазу спричинений притягальними взаємодіями між молекулами білка. Проте конкретні деталі цього процесу залишаються нез'ясованими. Вагомих результатів вдалося досягнути на основі моделей і методів, розроблених у фізиці колоїдів, зокрема, відомої моделі Дерюгіна–Ландау–Верві–Овербека (DLVO) [12–14], де білки моделюються сферичними частинками, що взаємодіють через конкуруючі відштовхувальні кулонівські та притягальні ван–дер–ваальсівські потенціали. Впродовж років [14] ця модель неодноразово модифікувалася. Найбільш суттєві зміни було внесено на основі параметризації результатів експериментів із рентгенівськими променями з малим кутом розсіювання (SAXS / SANS) [15, 16]. Білок лізоциму є однією з найбільш досліджених методами SANS системою [17–21].

Для теоретичного опису цього білка найчастіше використовується потенціал подвійної Юкави, що імітує DLVO. Отриманий на основі даних, параметризованих для 2-го віріального коефіцієнта, цей потенціал успішно описує фазові діаграми [22, 23], однак структурні функції з його допомогою відтворюються не надто якісно [24]. Для вирішення цієї проблеми запропоновано виводити форму потенціалу взаємодії безпосередньо з експериментальних структурних функцій за допомогою теорії рідкого стану [25, 26]. Практичне втілення цієї ідеї базується на теорії інтегральних рівнянь [26], яка є не дуже точною, особливо в області зростаючих густин. Крім того, залишається незрозумілим, наскільки добре виведена модель відтворює фазову поведінку білкового розчину, зокрема, фазове розшарування. Слід зауважити, що відомі на сьогодні моделі опису молекули білка [25, 27, 28] нездатні одночасно відтворювати структуру та фазову поведінку білкових розчинів.

У роботі [29] нами запропоновано теоретичну модель, яка усуває недоліки, описані вище. Для виведення потенціалу взаємодії між молекулами білка лізоциму використано метод інверсії Больцмана в поєднанні з методом молекулярної динаміки. Виведення ґрунтувалося на основі експериментальних даних для статичного структурного фактора, що забезпечило точне відтворення структури розчину. Встановлено, що потенціал взаємодії має м'яке відштовхування на коротких відстанях і притягальну яму на проміжних відстанях. Остання, як і передбачалося, призводить до фазового розшарування рідина-рідина. Більше того, методом моделювання фазової діаграми в ансамблі Гіббса встановлено, що форма білка відіграє ключову роль у визначенні меж фазової рівноваги. Зокрема, для критичних параметрів несферична форма молекули дозволяє отримати краще узгодження з експериментом, ніж сферична форма. Деталі коротко висвітлено на Рис. 1.

Проведене дослідження наближує нас до відповіді на актуальне в молекулярній та клітинній біології запитання: «Як моделювати білки в їхньому природному водному середовищі?».

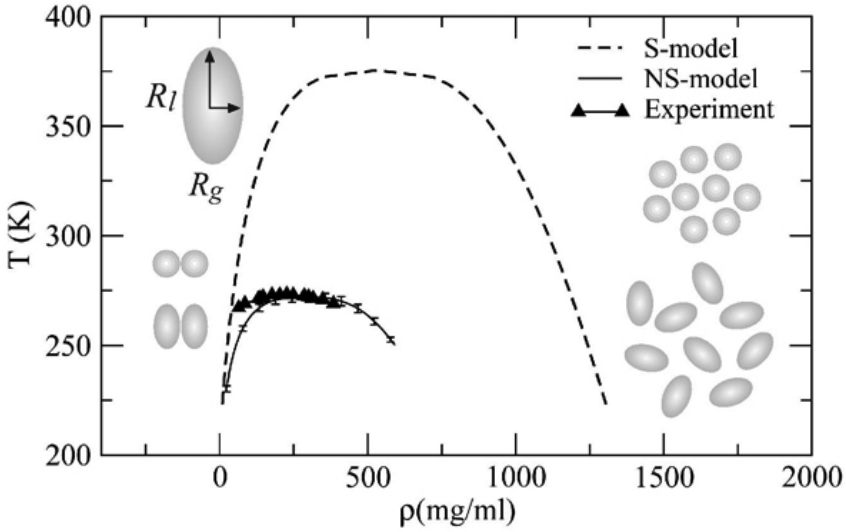


Рис. 1. Фазова діаграма розчину лізоциму при pH=6. Показано експериментальні дані, а також результати теоретичного моделювання з використанням різних представлень білка [29].

Білкові кластери

Термін «кластер» стосується великого розмаїття об'єктів, що виникають в результаті асоціації мономерів в усіляких м'яких матеріалах [30], та знаходяться в широкому діапазоні розмірів: від малих олігомерів до мезоскопічних доменів [31]. Кластери перебувають у рівновазі з мономерами і, крім білків [32], спостерігаються в колоїдних суспензіях [33], синтетичних клеях [34], у металічних наночастинках [35]. За відповідних термодинамічних умов рівноважні кластери стають домінантною компонентою розчину. Вони можуть також виникати тимчасово, як наслідок фазового переходу [36]. Як частковий випадок явища самоорганізації, утворення кластерів є особливо цікавим для фундаментальних досліджень, зокрема, для фізики конденсованої речовини, а також має цінні практичні застосування, наприклад, як механізм доставки ліків [37]. Кластери можуть значно змінювати механічні властивості водних розчинів, в яких вони утворюються. Так відбувається, зокрема, в розчинах моноклонних білків–антитіл, які демонструють значне зростання в'язкості внаслідок присутності кластерів [38]. А тому існує нагальна потреба в розумінні принципів, що лежать в основі утворення кластерів, з метою їх успішного використання в терапевтичних цілях.

Історично можливість утворення кластерів в однорідних плинах вперше розглядалася в рамках концепції конкуруючих взаємодій (SALR – short–range attraction SA, long–range repulsion LR). Вивчаючи фазові переходи в системах із притягальним потенціалом взаємодії, Лебовіц і Пенроуз [39] поставили питання про роль додаткової відштовхувальної частини в потенціалі, радіус якої більший, аніж притягальної. Було зроблено висновок, що рідина, яка утворюється завдяки притяганню між частинками в ході фазового переходу першого роду газ-рідина, розділиться на краплі, розмір яких буде більшим від розміру колоїдних частинок, але меншим від радіуса відштовхування. Протягом останніх сорока років цей сценарій було виявлено в багатьох системах із різноманітними потенціалами. Кендрик та ін. [40] розглядали систему колоїдів, які взаємодіють через відштовхувальні кулонівські та притягальні ван–дер–ваальсові сили, й дійшли висновку, що конкуренція між цими двома взаємодіями призводить до того, що критичну точку між рідинною фазою з малою густиною і рідинною фазою з великою густиною «витісняє критична точка зі скінченним хвильовим вектором» [40]. У результаті цього нового фазового переходу утворюються макрофази з неоднорідним розподілом густини. Та сама ідея конкуренції між короткосяжною притягальною і далекосяжною відштовхувальною взаємодією в простому плині згодом лягла в основу досліджень Сіра та ін. [41, 42] колоїдів на поверхні розділу повітря–вода. Аналітична теорія середнього поля [42] і комп'ютерні симуляції [41] вказують, що, й справді, замість розшарування фаз рідина-рідина (LLPS) колоїди утворюють різноманітні модульовані фази, серед яких – і скінченні кластери. У багатьох відношеннях вони подібні на утворення, що виникають унаслідок конкуренції між притяганням і відштовхуванням у складних плинах[43, 44]. Наступний крок було зроблено в роботі Грьонвольда та Кегеля [45], які показали, що модель колоїду, яка має змінний поверхневий заряд, може приводити до стабілізації кластерів великого розміру. Після цієї публікації появилася велика кількість робіт, присвячених кластерам у системах SALR (див. [46, 47] і посилання в них), в яких основна увага зверталася на те, як розривається чи змінюється лінія LLPS через присутність відштовхування в потенціалі. Група Реатто [48, 49] використала складне й точне самоузгоджене наближення Орштейна-Церніке (SCOZA) в рамках теорії рідкого стану на основі інтегральних рівнянь, щоб знайти лінію, яка на фазовій діаграмі відокремлює фазу однорідного плину від фази кластерного плину, так звану лямбда-лінію. Передбачення SCOZA згодом порівняли з результатами на основі теорії функціоналу густини [50] і результатами симуляцій [51]. Неповний список інших аспектів систем SALR, що активно досліджувалися, включає: вплив радіуса притягання [52, 53], висоти бар'єру [54] і ролі хвоста потенціалу [55–59].

Ще один клас систем, де було знайдено кластери, – це колоїди HCSS із твердим ядром (hard core, HC) та відштовхувальним потенціалом взаємодії з

м'яким плечем (soft shoulder, SS) [30]. Стелл і Геммер у своїй фундаментальній роботі [60] показали, що завдяки додатковій шкалі довжин (одна шкала визначається розміром частинки колоїду, а друга – розміром плеча) такий потенціал має дуже незвичні властивості. Окрім очікуваного переходу газ–рідина, що закінчується в критичній точці, потенціал із плечем може призводити до переходу рідина–рідина, що також закінчується в критичній точці. Були проведені численні дослідження особливостей нових фазових переходів, а також того, чи ця модель здатна пояснити термодинамічні аномалії води в рідкому стані [61–65]. Проте кластери не були особливим предметом цих досліджень аж до роботи Кляйна та ін. [66]. Використовуючи аналітичну теорію та комп'ютерні симуляції, ці автори показали, що частинки колоїду, які взаємодіють через потенціали з твердим ядром і м'яким плечем, утворюють у рідинній фазі сферичні кластери. При низьких температурах ці кластери формують кластерні кристали, кластерне скло, полікристалічні матеріали [66]. Згодом для того ж потенціалу, але в двовимірному випадку, Норізо і Кавакацу [67, 68] також продемонстрували утворення продовгуватих або подібних на струни кластерів. Продовгуваті, ланцюгоподібні кластери спостерігав і Камп [69] для неперервного відштовхувального потенціалу з плечем (відмінного від HCSS) і показав, що саме плече приводить до утворення кластерів. Окрім кластерів, HCSS приводять до утворення різноманітних упорядкованих фаз при низьких температурах. Меласіо і Пелікане [70] знайшли звичайні стрічкові фази, а Глейсер та ін. [71] виявили кластерні кристали і кластерні плини за допомогою симуляцій методом Монте–Карло. Кластерні плини знайшли також Младек та ін. [72], стрічки – Форнляйтнер і Каль [73], а ламели, гексагональні стовпчикові й об'ємноцентровані кубічні фази, а також асоційовані інверсні структури – Шін та ін. [74]. Дотера та ін. [75] описав розмаїті двовимірні квазікристалічні структури, що утворюються при низьких температурах.

Необхідно зауважити, що для колоїдів із відштовхувальною взаємодією тверде ядро не є обов'язковим для утворення кластерів. Лікос та ін. [76] розглядали обмежені в початку координат потенціали, що мають плоску частину HCSS без твердого ядра, і запровадили критерій того, чи система з таким потенціалом зазнаватиме мікроскопічного фазового розшарування на ґраткові стани, в яких багато колоїдних частинок займають той самий вузол ґратки. Цей критерій згодом успішно перевірили за допомогою комп'ютерних симуляцій [77], які й справді виявили кластерні кристали. Експериментально показано, що відштовхувальні [33, 36], а також притягальні [78] колоїди утворюють кластери.

Потенціали з твердим ядром, SALR та HCSS, що приводять до появи кластерів, схематично показано на Рис. 2.

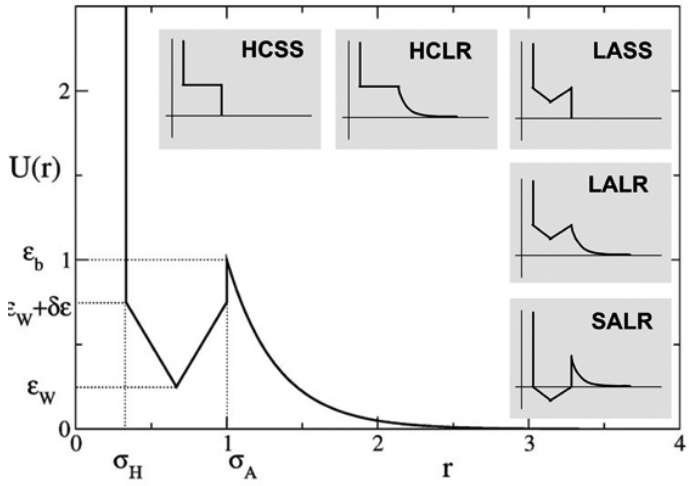


Рис. 2. Схематичне зображення потенціалів, які приводять до появи кластерів та мають тверде ядро.

В роботі [79] також показано, що потенціал, який не належить до жодного з цих класів, теж може приводити до утворення рівноважних кластерів. Нами запроваджено потенціали, які замість глобального мінімуму, як у схемі SALR, мають локальний мінімум із додатною енергією, що відокремлений скінченним бар'єром від станів із нульовою енергією на великих відстанях (LALR), див. Рис. 2. Модель LALR, як і потенціал HCSS, має глобальний відштовхувальний характер і м'яке плече. Експериментально такі потенціали можуть виникати в результаті неповної компенсації притягального та відштовхувального членів. Зокрема, нами отримано потенціал такої форми для білка лізоциму [80] (див. Рис. 3(a)). Показано, що мінімум є ключовим для виникнення правильної залежності структурного фактора системи від концентрації білка. Зокрема, він відповідає за зміщення положення максимуму на коротких хвильових векторах, що спостерігається експериментально. Відповідні дані показано на Рис. 3 (b). Рівноважні кластери спостерігаються в усьому діапазоні концентрацій, але їх природа змінюється в залежності від концентрації. При низьких концентраціях кластери мають видовжену форму. Коли концентрація збільшується, малі кластери зникають і перетворюються у великі кластери внаслідок самоасоціації. Гідродинамічні взаємодії приводять до кінетичного сповільнення при високих концентраціях в режимі, де спостерігається перехід у рідину кластерів певного розміру. Добре узгодження з наявними експериментальними даними дозволяє нашим дослідженням пролити нове світло на мікроскопічний характер білкових кластерів.

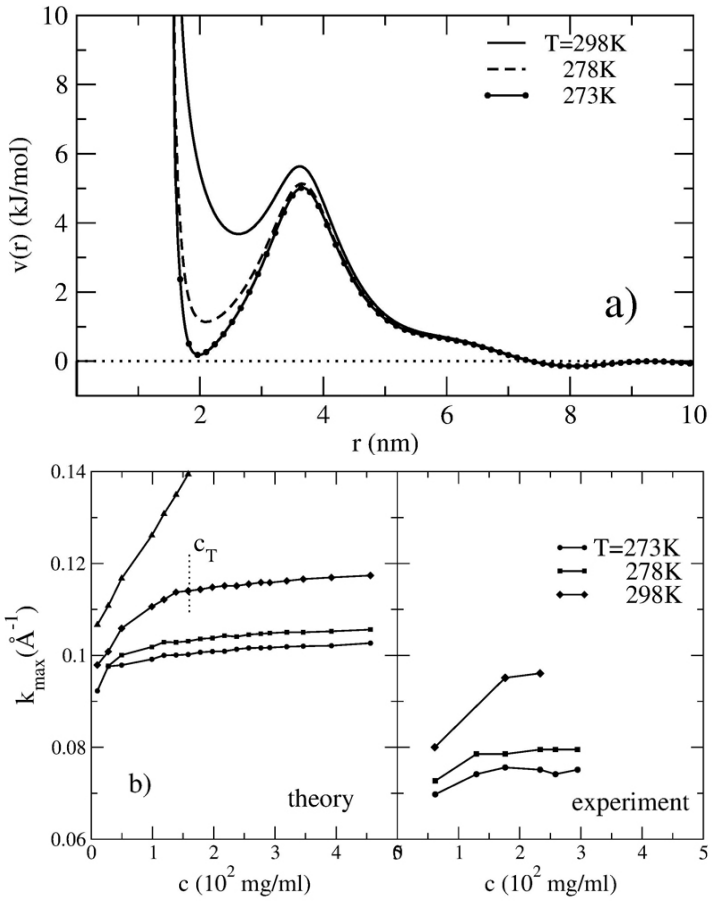


Рис. 3. a) потенціал типу LALR, отриманий для взаємодій між молекулами білка лізоциму [80]; b) положення першого максимума (короткохвильового) в залежності від концентрації розчину. Теоретичні і експериментальні дані показують ту саму тенденцію в $k_{\max(c)}$.

Література

1. *Venter C., Cohen D.* The 21st century: The century of biology // *New Perspectives Quarterly*. 1997. Vol. 14, P. 26–31.
2. *Lander E.S., Linton L.M., Birren B., Nusbaum C., Zody M.C., Baldwin J., Devon K., Dewar K., Doyle M., FitzHugh W.* Initial sequencing and analysis of the human genome // *Nature*. 2001. Vol. 409, no. 6822. P. 860–921.
3. *The Genomes Project C.* An integrated map of genetic variation from 1,092 human genomes // *Nature*. 2012. Vol. 491, P. 56.
4. *nobelprize.org*. The Nobel Prize in Chemistry 2013: Nobel Media AB 2014.
5. *Senior A.W., Evans R., Jumper J., Kirkpatrick J., Sifre L., Green T., Qin C., Žídek A., Nelson A.W.R., Bridgland A., Penedones H., Petersen S., Simonyan K., Crossan S., Kohli P., Jones D.T., Silver D., Kavukcuoglu K.,*

Hassabis D. Improved protein structure prediction using potentials from deep learning // *Nature*. 2020. Vol. 577, no. 7792. P. 706–710.
6. *Ishimoto C., Tanaka T.* Critical behavior of a binary mixture of protein and salt water // *Physical Review Letters*. 1977. Vol. 39, no. 8. P. 474.
7. *Zhang F., Roth R., Wolf M., Roosen-Runge F., Skoda M.W., Jacobs R.M., Stzucki M., Schreiber F.* Charge-controlled metastable liquid–liquid phase separation in protein solutions as a universal pathway towards crystallization // *Soft Matter*. 2012. Vol. 8, no. 5. P. 1313–1316.
8. *Benedek G.* The molecular basis of cataract formation // *Human Cataract Formation*. 1984. P. 237–247.
9. *Hyman A.A., Weber C.A., Jülicher F.* Liquid-liquid phase separation in biology // *Annual review of cell and developmental biology*. 2014. Vol. 30, P. 39–58.
10. *Benedek G.B., Pande J., Thurston G.M., Clark J.I.* Theoretical and experimental basis for the inhibition of cataract // *Progress in retinal and eye research*. 1999. Vol. 18, no. 3. P. 391–402.
11. *Dumetz A.C., Chockla A.M., Kaler E.W., Lenhoff A.M.* Protein phase behavior in aqueous solutions: crystallization, liquid-liquid phase separation, gels, and aggregates // *Biophysical journal*. 2008. Vol. 94, no. 2. P. 570–583.
12. *Israelachvili J.N.* Intermolecular and surface forces.: Academic press, 2011.
13. *Eberstein W., Georgalis Y., Saenger W.* Molecular interactions in crystallizing lysozyme solutions studied by photon correlation spectroscopy // *Journal of crystal growth*. 1994. Vol. 143, no. 1–2. P. 71–78.
14. *Broide M.L., Tominc T.M., Saxowsky M.D.* Using phase transitions to investigate the effect of salts on protein interactions // *Physical Review E*. 1996. Vol. 53, no. 6. P. 6325.
15. *Malfois M., Bonneté F., Belloni L., Tardieu A.* A model of attractive interactions to account for fluid–fluid phase separation of protein solutions // *The Journal of chemical physics*. 1996. Vol. 105, no. 8. P. 3290–3300.
16. *Ducruix A., Guilloteau J.P., Riès-Kautt M., Tardieu A.* Protein interactions as seen by solution X-ray scattering prior to crystallogenesis // *Journal of crystal growth*. 1996. Vol. 168, no. 1–4. P. 28–39.
17. *Niebuhr M., Koch M.H.J.* Effects of Urea and Trimethylamine-N-Oxide (TMAO) on the Interactions of Lysozyme in Solution // *Biophysical Journal*. 2005. Vol. 89, no. 3. P. 1978–1983.
18. *Shukla A., Mylonas E., Di Cola E., Finet S., Timmins P., Narayanan T., Svergun D.I.* Absence of equilibrium cluster phase in concentrated lysozyme solutions // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 2008. Vol. 105, no. 13. P. 5075–5080.
19. *Schroer M.A., Markgraf J., Wieland D.F., Sahle C.J., Möller J., Paulus M., Tolan M., Winter R.* Nonlinear pressure dependence of the interaction

potential of dense protein solutions // *Physical review letters*. 2011. Vol. 106, no. 17. P. 178102.
20. *Möller J., Schroer M.A., Erlkamp M., Grobelny S., Paulus M., Tiemeyer S., Wirkert F.J., Tolan M., Winter R.* The effect of ionic strength, temperature, and pressure on the interaction potential of dense protein solutions: from nonlinear pressure response to protein crystallization // *Biophysical journal*. 2012. Vol. 102, no. 11. P. 2641–2648.
21. *Chinchalikar A., Aswal V., Kohlbrecher J., Wagh A.* Small-angle neutron scattering study of structure and interaction during salt-induced liquid-liquid phase transition in protein solutions // *Physical Review E*. 2013. Vol. 87, no. 6. P. 062708.
22. *Pellicane G., Costa D., Caccamo C.* Phase coexistence in a DLVO model of globular protein solutions // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2003. Vol. 15, no. 3. P. 375.
23. *Pellicane G., Costa D., Caccamo C.* Microscopic determination of the phase diagrams of lysozyme and γ-crystallin solutions // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2004. Vol. 108, no. 23. P. 7538–7541.
24. *Pellicane G.* Colloidal model of lysozyme aqueous solutions: a computer simulation and theoretical study // *J Phys Chem B*. 2012. Vol. 116, no. 7. P. 2114-20.
25. *Abramo M.C., Caccamo C., Cavero M., Costa D., Pellicane G., Ruberto R., Wanderlingh U.* Effective protein-protein interaction from structure factor data of a lysozyme solution // *J Chem Phys*. 2013. Vol. 139, no. 5, P. 054904.
26. *Sumi T., Imamura H., Morita T., Isogai Y., Nishikawa K.* Model-potential-free analysis of small angle scattering of proteins in solution: insights into solvent effects on protein–protein interaction // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2014. Vol. 16, no. 46. P. 25492–25497.
27. *Rosch T.W., Errington J.R.* Investigation of the phase behavior of an embedded charge protein model through molecular simulation // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2007. Vol. 111, no. 43. P. 12591–12598.
28. *Carlsson F., Malmsten M., Linse P.* Monte Carlo simulations of lysozyme self-association in aqueous solution // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2001. Vol. 105, no. 48. P. 12189–12195.
29. *Baumketner A., Melnyk R., Holovko M.F., Cai W., Costa D., Caccamo C.* Softness and non-spherical shape define the phase behavior and the structural properties of lysozyme in aqueous solutions // *Journal of Chemical Physics*. 2016. Vol. 144, no. 1. P. 015103.
30. *Dinsmore A.D., Dubin P.L., Grason G.M.* Clustering in Complex Fluids // *Journal of Physical Chemistry B*. 2011. Vol. 115, no. 22. P. 7173–7174.
31. *Vekilov P.G.* Nucleation of protein condensed phases // *Reviews in Chemical Engineering*. 2011. Vol. 27, no. 1–2. P. 1–13.

32. *Stradner A., Sedgwick H., Cardinaux F., Poon W.C.K., Egelhaaf S.U., Schurtenberger P.* Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids // *Nature*. 2004. Vol. 432, no. 7016. P. 492–495.
33. *Osterman N., Babic D., Poberaj I., Dobnikar J., Ziherl P.* Observation of condensed phases of quasiplanar core-softened colloids // *Physical Review Letters*. 2007. Vol. 99, no. 24. P. 248301.
34. *Atmuri A.K., Bhatia S.R.* Polymer-Mediated Clustering of Charged Anisotropic Colloids // *Langmuir*. 2013. Vol. 29, no. 10. P. 3179–3187.
35. *Tam J.M., Murthy A.K., Ingram D.R., Nguyen R., Sokolov K.V., Johnston K.P.* Kinetic Assembly of Near-IR-Active Gold Nanoclusters Using Weakly Adsorbing Polymers to Control the Size // *Langmuir*. 2010. Vol. 26, no. 11. P. 8988–8999.
36. *Janai E., Schofield A.B., Sloutskin E.* Non-crystalline colloidal clusters in two dimensions: size distributions and shapes // *Soft Matter*. 2012. Vol. 8, no. 10. P. 2924–2929.
37. *Xu S., Sun C., Guo J., Xu K., Wang C.* Biopolymer-directed synthesis of high-surface-area magnetite colloidal nanocrystal clusters for dual drug delivery in prostate cancer // *Journal of Materials Chemistry*. 2012. Vol. 22, no. 36. P. 19067–19075.
38. *Yearley E.J., Godfrin P.D., Perevozchikova T., Zhang H.L., Falus P., Porcar L., Nagao M., Curtis J.E., Gawande P., Taing R., Zarraga I.E., Wagner N.J., Liu Y.* Observation of Small Cluster Formation in Concentrated Monoclonal Antibody Solutions and Its Implications to Solution Viscosity // *Biophysical Journal*. 2014. Vol. 106, no. 8. P. 1763–1770.
39. *Lebowitz J.L., Penrose O.* Rigorous Treatment of Van Der Waals-Maxwell Theory of Liquid-Vapor Transition // *Journal of Mathematical Physics*. 1966. Vol. 7, no. 1. P. 98–113.
40. *Kendrick G.F., Sluckin T.J., Grimson M.J.* Macrocrystal Phases in Charged Colloidal Suspensions // *Europhysics Letters*. 1988. Vol. 6, no. 6. P. 567–572.
41. *Sear R.P., Chung S.W., Markovich G., Gelbart W.M., Heath J.R.* Spontaneous patterning of quantum dots at the air-water interface // *Physical Review E*. 1999. Vol. 59, no. 6. P. R6255–R6258.
42. *Sear R.P., Gelbart W.M.* Microphase separation versus the vapor-liquid transition in systems of spherical particles // *Journal of Chemical Physics*. 1999. Vol. 110, no. 9. P. 4582–4588.
43. *Wu D., Chandler D., Smit B.* Electrostatic Analogy for Surfactant Assemblies // *Journal of Physical Chemistry*. 1992. Vol. 96, no. 10. P. 4077–4083.
44. *Seul M., Andelman D.* Domain Shapes and Patterns – the Phenomenology of Modulated Phases // *Science*. 1995. Vol. 267, no. 5197. P. 476–483.

45. *Groenewold J., Kegel W.K.* Anomalously large equilibrium clusters of colloids // *Journal of Physical Chemistry B*. 2001. Vol. 105, no. 47. P. 11702–11709.
46. *Zhang T.H., Kuipers B.W.M., Tian W.D., Groenewold J., Kegel W.K.* Polydispersity and gelation in concentrated colloids with competing interactions // *Soft Matter*. 2015. Vol. 11, no. 2. P. 297–302.
47. *Sweatman M.B., Fartaria R., Lue L.* Cluster formation in fluids with competing short-range and long-range interactions // *Journal of Chemical Physics*. 2014. Vol. 140, no. 12. P. 124508.
48. *Pini D., Ge J.L., Parola A., Reatto L.* Enhanced density fluctuations in fluid systems with competing interactions // *Chemical Physics Letters*. 2000. Vol. 327, no. 3–4. P. 209–215.
49. *Pini D., Parola A., Reatto L.* Freezing and correlations in fluids with competing interactions // *Journal of Physics-Condensed Matter*. 2006. Vol. 18, no. 36. P. S2305–S2320.
50. *Archer A.J., Pini D., Evans R., Reatto L.* Model colloidal fluid with competing interactions: Bulk and interfacial properties // *Journal of Chemical Physics*. 2007. Vol. 126, no. 1. P. 014104.
51. *Archer A.J., Wilding N.B.* Phase behavior of a fluid with competing attractive and repulsive interactions // *Physical Review E*. 2007. Vol. 76, no. 3. P. 031501.
52. *Charbonneau P., Reichman D.R.* Systematic characterization of thermodynamic and dynamical phase behavior in systems with short-ranged attraction // *Physical Review E*. 2007. Vol. 75, no. 1. P. 011507.
53. *Tarzia M., Coniglio A.* Lamellar order, microphase structures, and glassy phase in a field theoretic model for charged colloids // *Physical Review E*. 2007. Vol. 75, no. 1. P. 011410.
54. *Costa D., Caccamo C., Bomont J.M., Bretonnet J.L.* Theoretical description of cluster formation in two-Yukawa competing fluids // *Molecular Physics*. 2011. Vol. 109, no. 23–24. P. 2845–2853.
55. *Groenewold J., Kegel W.K.* Colloidal cluster phases, gelation and nuclear matter // *Journal of Physics-Condensed Matter*. 2004. Vol. 16, no. 42. P. S4877–S4886.
56. *Imperio A., Reatto L.* A bidimensional fluid system with competing interactions: spontaneous and induced pattern formation // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2004. Vol. 16, no. 38. P. S3769–S3789.
57. *Hutchens S.B., Wang Z.G.* Metastable cluster intermediates in the condensation of charged macromolecule solutions // *Journal of Chemical Physics*. 2007. Vol. 127, no. 8. P. 084912.
58. *Liu Y., Chen W.R., Chen S.H.* Cluster formation in two-Yukawa fluids // *Journal of Chemical Physics*. 2005. Vol. 122, no. 4. P. 044507.

59. *Schwanzer D.F., Kahl G.* Two-dimensional systems with competing interactions: microphase formation versus liquid-vapour phase separation // *Journal of Physics-Condensed Matter*. 2010. Vol. 22, no. 41. P. 415103.
60. *Hemmer P.C., Stell G.* Fluids with Several Phase Transitions // *Physical Review Letters*. 1970. Vol. 24, no. 23. P. 1284–1287.
61. *Stell G., Hemmer P.C.* Phase-Transitions Due to Softness of Potential Core // *Journal of Chemical Physics*. 1972. Vol. 56, no. 9. P. 4274–4286.
62. *Young D.A., Alder B.J.* Melting-Curve Extrema from a Repulsive Step Potential // *Physical Review Letters*. 1977. Vol. 38, no. 21. P. 1213–1216.
63. *Jagla E.A.* Core-softened potentials and the anomalous properties of water // *Journal of Chemical Physics*. 1999. Vol. 111, no. 19. P. 8980–8986.
64. *Rzysko W., Pizio O., Patrykiejew A., Sokolowski S.* Phase diagram of a square-shoulder, square-well fluid revisited // *Journal of Chemical Physics*. 2008. Vol. 129, no. 12. P. 124502.
65. *Buldyrev S.V., Malescio G., Angell C.A., Giovambattista N., Prestipino S., Saija F., Stanley H.E., Xu L.* Unusual phase behavior of one-component systems with two-scale isotropic interactions // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2009. Vol. 21, no. 50. P. 504106.
66. *Klein W., Gould H., Ramos R.A., Clejan I., Melcuk A.I.* Repulsive Potentials, Clumps and the Metastable Glass Phase // *Physica A*. 1994. Vol. 205, no. 4. P. 738-746.
67. *Norizoe Y., Kawakatsu T.* Monte Carlo simulation of string-like colloidal assembly // *Europhysics Letters*. 2005. Vol. 72, no. 4. P. 583–589.
68. *Norizoe Y., Kawakatsu T.* Particle Monte Carlo simulation of string-like colloidal assembly in two and three dimensions // *Journal of Chemical Physics*. 2012. Vol. 137, no. 2. P. 024904.
69. *Camp P.J.* Structure and phase behavior of a two-dimensional system with core-softened and long-range repulsive interactions // *Physical Review E*. 2003. Vol. 68, no. 6. P. 061506.
70. *Malescio G., Pellicane G.* Stripe patterns in two-dimensional systems with core-corona molecular architecture // *Physical Review E*. 2004. Vol. 70, no. 2. P. 021202.
71. *Glaser M.A., Grason G.M., Kamien R.D., Kosmrlj A., Santangelo C.D., Ziherl P.* Soft spheres make more mesophases // *EPL*. 2007. Vol. 78, no. 4. P. 46004.
72. *Mladek B.M., Gottwald D., Kahl G., Neumann M., Likos C.N.* Clustering in the absence of attractions: Density functional theory and computer Simulations // *Journal of Physical Chemistry B*. 2007. Vol. 111, no. 44. P. 12799–12808.
73. *Fornleitner J., Kahl G.* Lane formation vs. cluster formation in two-dimensional square-shoulder systems – A genetic algorithm approach // *EPL*. 2008. Vol. 82, no. 1. P. 18001.

74. *Shin H.M., Grason G.M., Santangelo C.D.* Mesophases of soft-sphere aggregates // *Soft Matter*. 2009. Vol. 5, no. 19. P. 3629–3638.
75. *Dotera T., Oshiro T., Ziherl P.* Mosaic two-lengthscale quasicrystals // *Nature*. 2014. Vol. 506, no. 7487. P. 208–211.
76. *Likos C.N., Lang A., Watzlawek M., Lowen H.* Criterion for determining clustering versus reentrant melting behavior for bounded interaction potentials // *Physical Review E*. 2001. Vol. 63, no. 3. P. 031206.
77. *Mladek B.M., Gottwald D., Kahl G., Neumann M., Likos C.N.* Formation of polymorphic cluster phases for a class of models of purely repulsive soft spheres // *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 96, no. 4. P. 045701.
78. *Klix C.L., Royall C.P., Tanaka H.* Structural and Dynamical Features of Multiple Metastable Glassy States in a Colloidal System with Competing Interactions // *Physical Review Letters*. 2010. Vol. 104, no. 16. P. 165702.
79. *Baumketner A., Cai W.* Equilibrium clusters in suspensions of colloids interacting via potentials with a local minimum // *Condensed Matter Physics*. 2016. Vol. 19, no. 1. P. 13605
80. *Baumketner A., Cai W.* Clusters of lysozyme in aqueous solutions // *Physical Reviews E*. 2018. Vol. 98, P. 032419.

Рідкокристалічні лінзи з керованою оптичною силою

С.П. Бєлих, В.Ю. Решетняк
(Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет)

У природі майже все живе має очі. Очі є делікатною оптичною системою із функціями акумуляції світла, оцінки відстані та візуалізації для пошуку партнерів, уникання хижаків та захоплення здобичі. Лінзи з регульованою фокусною відстанню існують в очах багатьох видів [див. 1–3 в роботі [1]]. Наприклад, лінзи очей ссавців вигнуті і можуть деформуватися, змінюючи фокусну відстань. Птахи та рептилії змінюють оптичну силу лінз своїх очей для збільшення або зменшення зображення. Оптичні прилади та інструменти, включаючи, наприклад, камери, телескопічні лінзи, штучні очі тощо, зазвичай розробляються використовуючи властивості лінз, що спостерігаються в природі. Існує багато прикладів штучних лінз із змінною фокусною відстанню [див. посилання 4–14 в роботі [1] ,нещодавній огляд [2], а також монографію [3]].

Лінза з адаптивним фокусом – це пристрій, здатний регулювати свою фокусну відстань під дією зовнішнього чинника. Звичайні (скляні) лінзи базуються на двох фізичних параметрах для модифікації оптичного фронту: (a) різниці між показником заломлення матеріалу лінзи та навколишнього середовища та (b) кривизні інтерфейсів між ними. Тому лінзи з адаптивним фокусом базуються на зміні або показника заломлення матеріалу лінзи, або кривизни його інтерфейсу. Запропоновано багато методів розробки адаптивних фокусних лінз. Умовно їх можна поділити на три основні групи: лінзи зі змінною оптичною силою, в яких тверді частини лінзи механічно переміщуються одна відносно іншої; рідкі лінзи, в яких змінюється профіль інтерфейсу та лінзи з модуляцією показника заломлення.

У першій групі оптична сила утвореної лінзи змінюється шляхом переміщення геометрично-доповнюючих частин з однаковим поверхневим профілем, що моє кубічну залежність кривизни. Лінзи такого типу були запропоновані наприкінці 1960-х років Луїсом Альваресом [4,5] та Адольфом Ломаном [6]. Лінзи Альвареса важко виготовити бо профіль їх складових частин описується кубічною функцією. Основна ідея рідких лінз – імітувати оптичний механізм роботи кришталиків людських очей. Рідкі лінзи функціонують за рахунок зміни об’єму ізотропної рідини всередині лінзи. У рідких лінзах ізотропна рідина обмежена мембранами, і фокусна відстань може бути змінена шляхом зміни кривизни цих мембран у відповідь на зовнішні чинники. Прикладами рідких лінз є лінзи з еластомерною мембраною, кривизна якої змінюється за допомогою сервомотору, п'єзоелектрика, внаслідок ефекту електрично керованого змочування,

діелектрофоретичного ефекту [див. посилання 14–18 в огляді [1]]. Одним із способів досягнення зміни оптичної сили лінзи без зміни кривизни границі є використання анізотропного оптичного середовища, такого як нематичні рідкі кристали (РК). Нематичні РК – це рідинні матеріали, що мають оптичну та діелектричну анізотропію. Молекули нематика змінюють свою орієнтацію під дією зовнішнього світлового, електричного або магнітного поля. Коли світло поширюється в нематичному РК, швидкість його руху залежить від оптичної анізотропії нематика, кута падіння та поляризації. При цьому просторовий профіль хвильового фронту світла, яке проходить через нематичний РК, змінюється, це приводить до збіжності або розбіжності світлової хвилі, що відповідає позитивній або негативній фокусній відстані. Нижче наведемо декілька типів лінз з керованою оптичною силою.

Тип I: лінзи із викривленим профілем інтерфейсу [10–14, 31, 50–59 в огляді [1]] .

Зміна фокусної відстані рідкої лінзи під зовнішніми чинниками може бути досягнута шляхом зміни кривизни мембран. Основними перевагами рідких лінз є велика регульована фокусна відстань (~40D) та оптична ізотропія. Основними недоліками є складність керування асферичною кривизною границі рідких лінз для корекції аберацій, гравітаційний ефект, громіздка структура, високе енергоспоживання завдяки використанню пристроїв, що керуються струмом [див. 10–14 в огляді [1]].

Тип II: лінзи з градієнтом показника заломлення так звані лінзи GRIN

Другий тип лінз з керованою оптичною силою – це лінзи з градієнтом показника заломлення (Gradient Index) [60–143 в огляді [1]]. Оптична фаза GRIN лінзи може бути знайдена як $\phi(r)=k\cdot n(r)\cdot d$, де $n(r)$ – просторово неоднорідний показник заломлення, а d – товщина GRIN лінзи, r – відстань до осі лінзи. Для створення GRIN лінзи із змінною фокусною відстанню зазвичай використовуються нематичні РК. Маніпулюючи просторовою орієнтацією нематичних молекул РК під дією електричного поля, можна досягти того, що кожна точка хвильового фронту лінійно поляризованої плоскої хвилі, що проходить через нематичний РК, набуває потрібного набігу фази. В результаті падаюча плоска хвиля перетворюється на збіжну або розбіжну параболоїдну хвилю. Переваги цього типу РК-лінз полягають у тому, що вони легкі, мають низьке енергоспоживання, та здатністю формувати асферичні профілі лінз, що є важливим для корекції аберацій та офтальмологічних застосувань. Однак природа конденсованої речовини та хімічні обмеження на РК призводять до обмежень щодо оптичної анізотропії та товщини шару РК. У даний час двопроменезаломлення рідкокристаличних матеріалів не перевищує одиниці.

Тип III: змішаний тип лінз

Лінзи змішаного типу – це комбінація лінз першого типу з криволінійним профілем границі та лінз другого типу з градієнтом показника заломлення [148–156 в огляді [1]]. Оптичною фазою для лінз цього типу є $\phi(\mathrm{r})=k\cdot n(\mathrm{r})\cdot \mathrm{d}(\mathrm{r})+k\cdot n_0'\cdot[\mathrm{d}_0-\mathrm{d}(\mathrm{r})]$, де $d(r)$ – просторовий розподіл товщини, $n(r)$ – просторово розподілений показник заломлення, d_0 – товщина в центрі лінзи, а n_0' – показник заломлення на зовнішній стороні криволінійної лінзи. Зазвичай для досягнення керованих РК-лінз змішаного типу криволінійна полімерна порожнина або порожнини заповнюються нематичними РК, і вся структура обмежується двома плоскими скляними підкладками з прозорими електродами (наприклад з ITO).

Інші типи лінз

РК-лінзи типу Френеля

Особливістю рефракційних лінз Френеля є можливість збільшення розмірів діафрагми РК лінзи [157–158 в огляді [1]]. Заломлюючі лінзи Френеля, зазвичай, мають поверхневі рельєфні структури, завдяки яким можуть бути отримані як сферичні або асферичні лінзи [157–158 в огляді [1]]. Лінзи такого типу були запропоновані та продемонстровані Сато та співавторами [159–161 в огляді [1]]. Для їх створення було використано два типи зонних пластин Френеля: амплітудні і фазові. Амплітудні лінзи Френеля мають непрозорі та прозорі бінарні зони. Але оскільки зони Френеля амплітудного типу зменшують інтенсивність падаючого світла, то в основному досліджуються фазові лінзи Френеля.

РК-лінзи з перемиканням поляризації

РК-лінза з перемиканням поляризації зазвичай складається з двох частин: РК-складової, за допомогою якої можна електрично керувати поляризацією світла та пасивного оптичного елемента – анізотропної лінзи [201-211 в огляді [1]]. Контролер поляризації функціонує як перемикач поляризації падаючого лінійно поляризованого світла на світло з ортогональною лінійною поляризацією. Для перемикання між двома ортогональними лінійними поляризаціями світла РК-частина лінзи робиться у вигляді напівхвильової пластини [201–204 в огляді [1]]. Пасивний оптичний елемент (тобто анізотропна лінза) має оптичну силу для різних лінійно поляризованих хвиль.

Поляризаційно незалежні лінзи

Використання поляризатора зменшує коефіцієнт пропускання РК-лінз. Щоб усунути вимогу щодо використання поляризатора, запропоновано

поляризаційно-незалежні лінзи [229–241 в огляді [1]]. Для досягнення однакового фазового перетворення двох власних станів поляризації світла, використовуються дві однакові нематичні РК-лінзи з оптичними осями орієнтованими ортогонально одна до одної [132–140 в огляді [1]]. Для збільшення регульованого діапазону фокусної відстані оптичний набіг фази можна збільшити, додавши пари ортогонально орієнтованих нематичних РК-шарів.

Моделювання РК лінз

У більшості випадків для утворення рідкокристалічних лінз використовуються нематичні рідкі кристали. Нематики є одновісними оптично анізотропними рідинами, тому їх ефективний показник заломлення залежить від кута між оптичною віссю (директором) та напрямком поширення світла

$$n(r) = \frac{n_0 \cdot n_e}{\sqrt{n_e^2 \cdot \sin^2\left(\theta(\vec{r})\right) + n_o^2 \cdot \cos\left(\theta(\vec{r})\right)}},$$

де $\theta(\vec{r})$ – кут переорієнтації директора, n_e, n_o – ефективний показник заломлення світла незвичайної та звичайної хвиль, відповідно. Щоб визначити, як падаюче світло поширюється крізь нематичну РК-лінзу (комірку), необхідно розв'язати рівняння Максвелла з діелектричним тензором на оптичній частоті, яка задається формулою

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = n_o^2 \cdot \delta_{ij} + \left(n_e^2 + n_o^2\right) \cdot \vec{N}_i(\vec{r}) \cdot \vec{N}_j(\vec{r}),$$

$\vec{N}_i(\vec{r})$ компоненти нематичного директора РК. Після того, як рішення буде знайдено, можна проаналізувати амплітуду, фазу та поляризацією світлового поля після проходження крізь лінзу. Пошук рішення рівнянь Максвелла в анізотропному та неоднорідному середовищі є складним завданням. Існують наближення, які базується на геометричній оптиці чи наближенні ейконалу [242–243 в огляді [1]]. Ці наближення, як правило, дають хорошу оцінку фази, яку набуває світло, що проходить через нематичний РК-шар. Світло, яке падає на прямокутну нематичну комірку, зазнає зміни фази на виході з комірки, що може бути апроксимовано за допомогою геометричної оптики як: $\Gamma = \frac{2\pi}{\lambda}\int_0^d n(x,y,z)dz$, де λ – довжина хвилі пучка світла, а d – товщина нематичної РК комірки [244 в огляді [1]]. У випадку похилого падіння вираз для зміни фази є дещо складнішим, оскільки напрямок поширення світла може викривлятися, при поширенні через нематичний шар. Для використання

наведеної вище формули потрібно знати профіль директора РК $\vec{N}_i(\vec{r})$, який буде залежати від прикладеної напруги до комірки. Щоб його обчислити, необхідно мінімізувати загальну вільну енергію:

$$F = F_{elastic} + F_{electric} + F_{flex} + F_{surface},$$

де вирази для пружної енергії, електричного поля, поверхневі доданки та флексополяризація задаються в кожній конкретній задачі по-своєму. Найпростіший вираз для енергії зчеплення відповідає потенціалу Рапіні [7].

Щоб знайти профіль електричного поля (V – електричний потенціал), потрібно вирішити рівняння Пуассона для електричного поля: $\operatorname{div}\vec{D} = 0, \vec{D} = \varepsilon_o \varepsilon \vec{E}, \vec{E} = -\vec{\nabla} V$.

Зручно представити нематичний директор РК за допомогою двох кутів, а саме $\theta(\vec{r})$ та $\varphi(\vec{r})$:

$$\mathbf{N}(x,y,z) = \left(\cos\theta(x,y,z)\cdot\cos\phi(x,y,z),\ \cos\theta(x,y,z)\cdot\sin\phi(x,y,z),\ \sin\theta(x,y,z)\right).$$

Просторовий профіль директора нематичного РК (кути $\theta(\vec{r})$ та $\varphi(\vec{r})$) знаходиться мінімізуючи загальну вільну енергію F. Мінімізація приводить до наступних рівнянь Ейлера-Лагранжа:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial F}{\partial \theta} - \left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial F}{\partial \theta_x} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial F}{\partial \theta_y} + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial F}{\partial \theta_z}\right) = 0; \\ &\frac{\partial F}{\partial \varphi} - \left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial F}{\partial \varphi_x} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial F}{\partial \varphi_y} + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial F}{\partial \varphi_z}\right) = 0; \end{aligned},$$

які мають задовольняти граничні умови на підкладках комірки

$$\begin{aligned} &\frac{\partial W_S}{\partial \theta} + \left(\frac{\partial F}{\partial \theta_x}\nu_x + \frac{\partial F}{\partial \theta_y}\nu_y + \frac{\partial F}{\partial \theta_z}\nu_z\right) = 0; \\ &\frac{\partial W_S}{\partial \varphi} + \left(\frac{\partial F}{\partial \varphi_x}\nu_x + \frac{\partial F}{\partial \varphi_y}\nu_y + \frac{\partial F}{\partial \varphi_z}\nu_z\right) = 0; \end{aligned}$$

де $\vec{\gamma}$ – одиничний вектор, зовнішня нормаль до поверхні, що обмежує нематичну РК-комірку.

Рівняння Ейлера-Лагранжа разом із граничними умовами та рівнянням Пуассона для електричного поля утворюють систему пов’язаних рівнянь. У випадку, коли обмежувальні підкладки вигнуті, нормаль залежить від просторових координат. Проблема пошуку профілю нематичного РК-директора в найбільш загальному випадку є доволі складною задачею, навіть якщо має місце сильне зчеплення директора з підкладками нематичної РК комірки.

Приклади моделювання лінз з адаптивним фокусом

У роботі [8] запропонована теоретична модель рідкокристалічної лінзи з фокусною відстанню залежною від напруги, в якій використовуються плоский шар рідкого кристалу і плоскі електроди. Просторова модуляція електричного поля в межах апертури лінзи отримується за рахунок діелектричної проникності «прихованого» шару. Діелектричні сталі двох матеріалів з яких складається «прихований» шар – різні, тоді як їх показники заломлення однакові, що оптично приховує цю структуру.

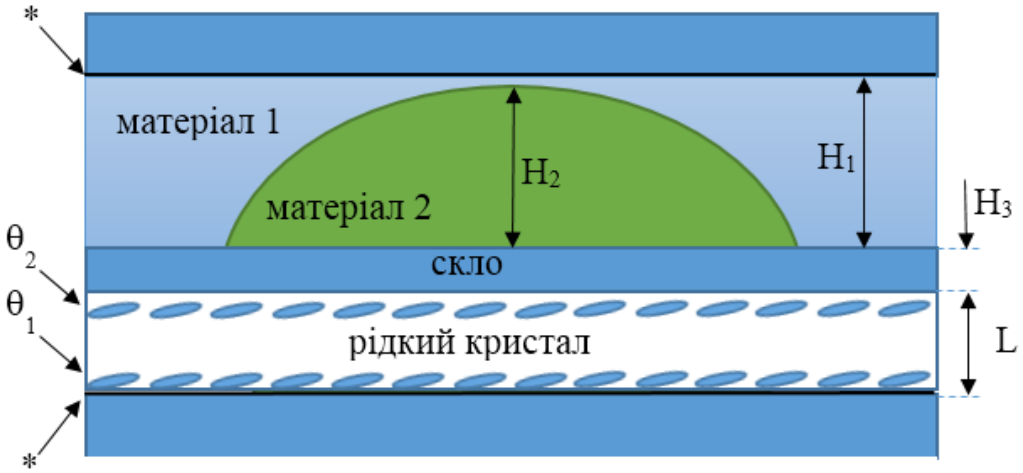


Рис. 1. Схема рідкокристалічної лінзи з «прихованим» діелектричним шаром, де * позначено електроди.

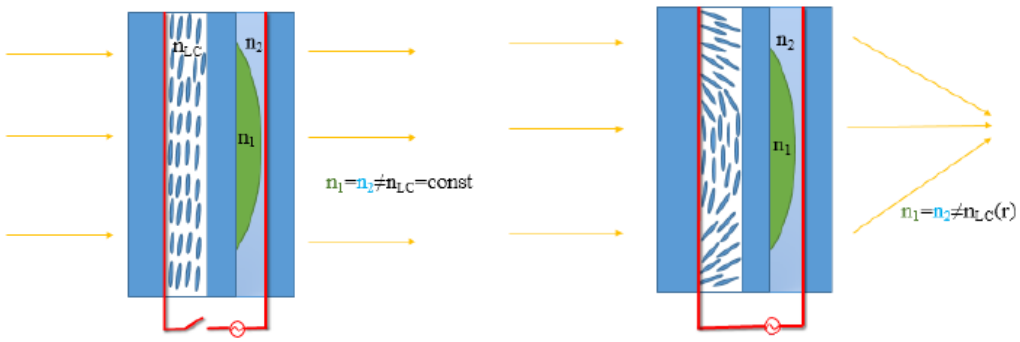


Рис. 2. Схема поширення світла крізь лінзу за відсутності та наявності напруги.

Теоретична модель добре узгоджується з експериментальними даними та дозволяє оптимізувати параметри лінзи [9] .

У роботі [10] розглянуто нещодавно розроблені рідкокристалічні контактні лінзи та проведено теоретичне моделювання існуючого прототипу. Будова рідкокристалічної контактної лінзи на основі нематичного рідкого кристалу зображено на наступному малюнку:

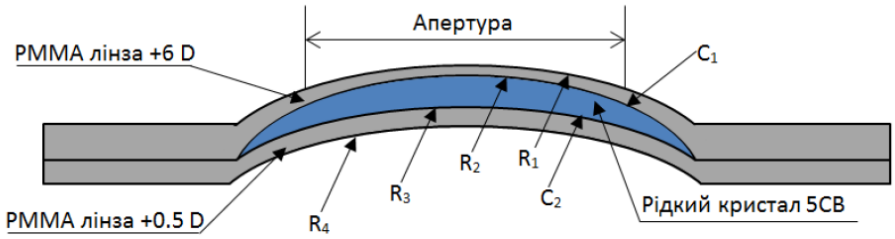


Рис. 3. Схема рідкокристалічної контактної лінзи, де C1, C2 позначено поверхні, на які нанесено плівки електродів та шар орієнтанту. Дві пластикові лінзи з'єднані між собою і склеєні епоксидним клеєм, а утворена між ними порожнина заповнена рідким кристалом 5CB.

Робота лінзи полягає в тому, що падаюча плоска хвиля, яка поширюється через рідкий кристал, отримує лінзоподібний набіг фази за рахунок викривленої геометрії системи та просторової модуляції оптичних властивостей рідкого кристалу. Проведене моделювання добре узгоджується з експериментальними даними.

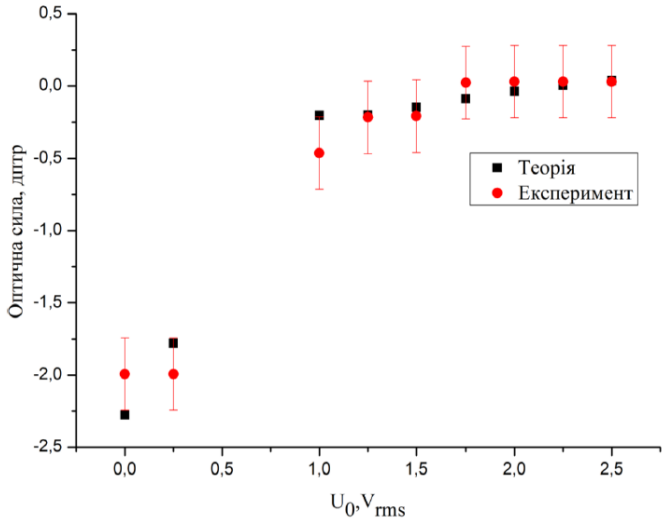


Рис. 5. Залежність оптичної сили лінзи від напруги при температурі T = 25 °C та частоті струму 1 kHz.

У роботі [11] запропоновано теоретичну модель лінзи, яка утворюється в комірці, заповненій фотополімером з квантовими точками. Лазерний промінь з гаусоподібним просторовим розподілом інтенсивності використовується для неоднорідної полімеризації з одночасним процесом дифузії мономерів та квантових точок. Це приводить до створення лінзоподібного показника заломлення в комірці. Показано, що зміна часу опромінювання суттєво змінює профіль показника заломлення і дозволяє контролювати фокусну відстань лінзи.

За останні роки спостерігається стрімке зростання досліджень оптичних властивостей лінз зі змінною фокусною відстанню. Вище наведено лише невелику частину наукових робіт, пов'язаних з даною тематикою.

Застосування рідкокристалічних лінз

Рідкокристалічні лінз знаходять застосування як в системи візуалізації, так і системах, що не пов'язані з візуалізацією. РК лінзи регулюють світловий потік або інтенсивність світла з метою концентрації світла; нематичні РК лінзи використовуються, зокрема, в системах віртуальної та доповненої реальності, у стільникових телефонах та веб-камерах, пікопроекторах, голографічних проекторах та для формування 3D зображень; у фотоелектричних системах, волоконній оптиці, тощо. Більшість конструкцій РК лінз, що використовуються зараз відносяться до лінз із градієнтом показника заломлення (GRIN лінзи).

Проблеми та перспективи

Дослідження та застосування РК-лінз стрімко зростає. Однак багато проблем залишаються ще нерозв'язаними, зокрема, створення лінз з оптичною силою більше 3 діоптрій. Для офтальмологічних застосувань для зменшення аберацій передавальна функція РК лінзи повинна бути асферичною, а не параболічною. Параболічний фазовий профіль лінзи є результатом використання параксіального наближення у моделювання. Електрично керовані лінзи з асферичним фазовим профілем ще недостатньо досліджені. Залишається складним завданням, як вийти за дифракційну межу. Особливо це важливо для біо-візуалізації, де потрібна більша роздільна здатність. Для окулярів потрібно розробити бездротове живлення. Інші технічні параметри, такі як час відгуку, керуюча напруга, частота електричного поля, коефіцієнт пропускання, хроматичні властивості та аберації, повинні бути адаптовані до конкретних застосувань. Електрично керовані лінзи, безумовно, матимуть великий вплив на оптику та оптометрію.

Література

1. Yi-Hsin Lin, Yu-Jen Wang & Victor Reshetnyak, Liquid crystal lenses with tunable focal length, Liquid Crystals Reviews, 5:2, 111–143, DOI: 10.1080/21680396.2018.1440256, 2017
2. Algorri, J.F.; Zografopoulos, D.C.; Urruchi, V.; Sánchez-Pena, J.M. Recent Advances in Adaptive Liquid Crystal Lenses. Crystals 2019, 9, 272. https://doi.org/10.3390/cryst9050272

3. Wu, S.-T.; Ren, H. Introduction to Adaptive Lenses; Wiley: Hoboken, NJ, USA, 2012.
4. Alvarez, L.W. Two-element variable-power spherical lens. U.S. Patent No. 3,305,294. 21 February 1967.
5. Alvarez, L.W. Development of variable- focus lenses and a new refractor. J. Am. Optom. Assoc. 1978, 49, 24.
6. Lohmann, A.W. A new class of varifocal lenses. Appl. Opt. 1970, 9, 1669.
7. Rapini A, Papoular M. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois. J Phys Colloq. 1969; 30(C4): 54–56.
8. O. Sova, V. Reshetnyak, T. Galstian, K. Asatryan *2015* Journal of the Optical Society of America A, 32, 803–808;
9. O. Sova, V. Reshetnyak, T. Galstian *2017* Journal of the Optical Society of America A, 34, 424–431;
10. V. Reshetnyak, O. Sova, Yu-Jen Wang, Yi-Hsin Lin, Modeling liquid crystal lenses, February Proc. SPIE 11303, Emerging Liquid Crystal Technologies XV, 2020 – 1130304.
11. S. Bielykh, T. Galstian, V.Yu. Reshetnyak, Theoretical modeling of photo-induced lens formation in a polymerizable matrix containing quantum dots, JOSA B. – 2018. –Vol. 35, no. 8. – P. 2029–2035.

Моделювання субдифузійного імпедансу у мультишарових наноструктурах

П.П. Костробій [1)], І.І. Григорчак [1)], Б.М. Маркович [1)], О.В. Візнович [1)], М.В. Токарчук [2,1)]

([1] Національний університет «Львівська політехніка»,
[2] Інститут фізики конденсованих систем, НАН України)

Сучасний етап розвитку технології на основі гетероструктурованих неорганічно/неорганічних, неорганічно/органічних нанокомпозитних матеріалів [1–3], з якими пов’язують можливість реалізації унікальних фізико-хімічних властивостей, стимулює теоретичні дослідження та математичне моделювання реакційно–електродифузійних процесів у таких системах.

Важливою прикладною задачею є опис напівпровідникових систем зі стадійним впорядкуванням, що виникає у шаруватих структурах при застосуванні методики попередньої інтеркаляції–деінтеркаляції для покращення входження гостьових частинок. У зв’язку з експериментальною складністю створення таких структур для прогнозування необхідних властивостей велике значення має побудова та дослідження математичних

моделей дифузійного імпедансу для ієрархічних структур. У таких ієрархічних структурах спостерігаються процеси аномальної (супер-, суб-) дифузії частинок, механізми яких далеко не вивчені. Дійсно, в сучасних дослідженнях процеси переносу, зокрема дифузія частинок у пористих середовищах, невпорядкованих структурах описується співвідношенням для їх середньоквадратичного зміщення: $\langle(\vec{r}(t)-\vec{r}(0))^2\rangle = 2D_\alpha t^\alpha / \Gamma(1+\alpha)$, де D_α – коефіцієнт «аномальної» дифузії, t – час, $\Gamma(1+\alpha)$ – гама-функція, параметр α, що змінюється в інтервалі $0<\alpha\le 1$. При $\alpha = 1$ дане співвідношення переходить у відоме співвідношення Ейнштейна $\langle(\vec{r}(t)-\vec{r}(0))^2\rangle = 2Dt$, де D – коефіцієнт дифузії, який входить у рівняння дифузії Фіка. Отже, маємо нефіковські процеси і виникає питання, які математичні моделі можуть їх описувати.

При досліджені електрохімічного імпедансу в просторово–неоднорідних системах процеси проходження струму описуються наступним співвідношенням частотної залежності узагальненого опору: $Z(i\omega) \propto (i\omega)^{-\beta/2}$, де параметр β змінюється в інтервалі $0<\beta\le 2$. При $\beta = 2$ дане співвідношення переходить в електрохімічний імпеданс Варбурга $Z(i\omega) \propto (i\omega)^{-1}$, якому відповідають фіковські процеси дифузії носіїв заряду. Це означає, що існують «аномальні» електрохімічні процеси переносу заряду в просторово–неоднорідних системах. З цієї точки зору побудова математичної моделі дифузійних процесів, що супроводжуються аномальною поведінкою, зокрема, для атомів та іонів у ієрархічних структурах є актуальною проблемою і має як теоретичне, так і прикладне значення. Розрахунок просторово–часової залежності неоднорідних коефіцієнтів дифузії в таких процесах є першочерговою проблемою, оскільки вони відповідають за основні механізми. Важливо зазначити, що розвитку кінетичної теорії на основі дробово–диференціальних рівнянь переносу для опису процесів переносу носіїв заряду в напівпровідникових структурах присвячена ціла низка робіт [4–7] феноменологічного та напівфеноменологічного характеру [8,9]. Ми розвинули нерівноважну статистичну теорію [10–16] для опису процесів переносу з просторово-часовою нелокальністю для гетерогенних систем, в рамках якої були отримані узагальнені рівняння типу дифузії Кеттано, Максвелла-Кеттано та інші в дробових часових та просторових похідних.

На основі рівняння дифузії типу Кеттано нами отримано результати математичного моделювання субдифузійних процесів в електролітичній системі для пояснення діаграм Найквіста експериментальних досліджень [1, 3] для системи GaSe з інкапсульованим β-циклодекстрином. Експериментальні дослідження імпедансних характеристик даних систем показали, що процеси переносу носіїв заряду мають нелінійний стадійний характер із

складною поведінкою релаксаційних процесів у часі. Для моделювання таких релаксаційних процесів застосовано рівняння дифузії типу Кеттано [11–13], яке для носіїв заряду подамо у вигляді:

$$\tau \frac{\partial^2 n(x;t)}{\partial t^2} + \frac{\partial n(x;t)}{\partial t} = D_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \frac{\partial^2 n(x;t)}{\partial x^2}, \qquad (1)$$

в якому параметри D_α – коефіцієнт субдифузії і τ (час, на який потік затримується відносно ґрадієнту концентрації носіїв заряду $n(x,t)$) розглядаються як незалежні один від одного. Проведено моделювання імпедансу електрохімічної системи $Z(i\omega)$, що знаходиться зі співвідношення $Z(i\omega) = R_W \dfrac{n(0,i\omega)}{j(0,i\omega)}$ (де R_W – опір Варбурга, $j(0,i\omega)$ – потік заряду, ω – частота), коли процес перенесення носіїв заряду описується узагальненим рівнянням Кеттано (1) з наступними початковими і граничними умовами (на границі L):

$$n(x,0) = \frac{\partial}{\partial t} n(x,t)_{|t=0} = 0, \;\; a_j j(L,t+\tau) + b_L n(L,t) = 0 .$$

У результаті на основі розв'язків рівняння Кеттано (1) застосувавши перетворення Лапласа розраховано імпеданс із зміною частоти $\omega \epsilon (10^{-1}, 10^5)$, при $R_W = 1$, $L = 1$ (рис. 1–4). Проведено розрахунки діаграм Найквіста для $\alpha = 0.6$, $\alpha = 0.8$ та $\alpha = 1$ при відповідних значеннях субдифузійного коефіцієнта $D_\alpha = 0.5$ і $D_\alpha = 1$ зі зміною часу τ. Як видно з рисунків, поведінка діаграм Найквіста зі зміною параметрів τ, α та коефіцієнта дифузії D_α дуже сильно змінюється. Спостерігається певна стадійність процесів переносу носіїв заряду, яка якісно відтворює результати експериментальних досліджень [1].

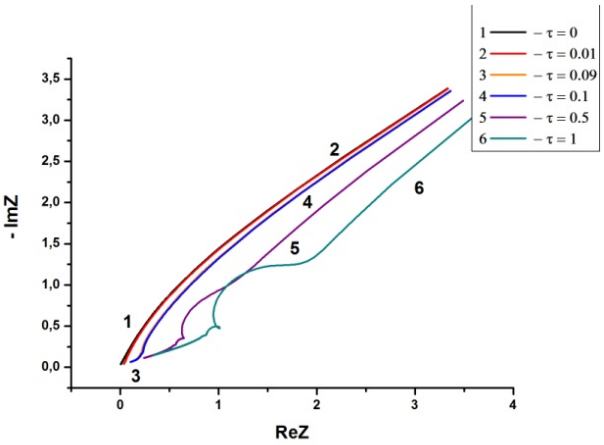


Рис. 1. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 0.5$ $\alpha = 0.6$ при різних значеннях τ.

На рис. 5 подані діаграми Найквіста, коли значення коефіцієнтів дифузії фіксовані, а змінюється час, на який потік затримується відносно ґрадієнта концентрації. Як видно, при $\tau = 0$ і $\tau = 0.01$ маємо дифузійний Варбург, при $\tau = 0.09$ і $\tau = 0.1$ різко змінюється характер і далі при $\tau = 0.5$ і $\tau = 1$ частотна залежність імпедансу набирає коливного характеру.

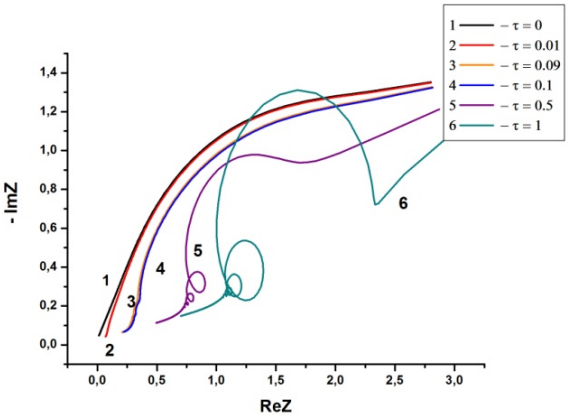


Рис. 2. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 0.5$ $\alpha = 0.8$ при різних значеннях τ .

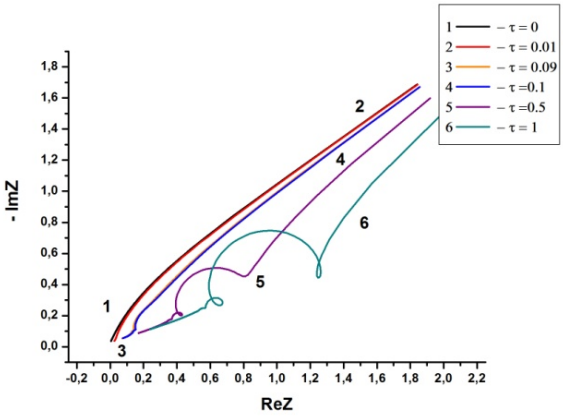


Рис. 3. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 1$ $\alpha = 0.6$ при різних значеннях τ .

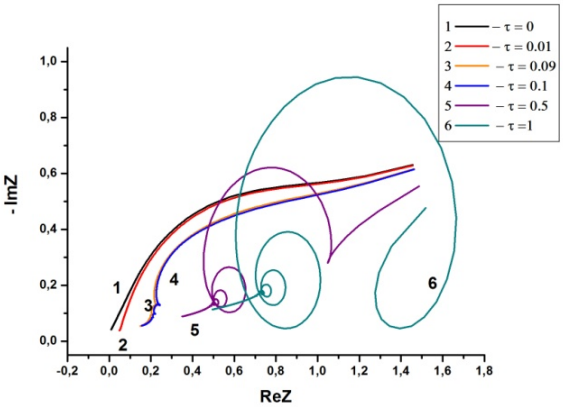


Рис. 4. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 1$ $\alpha = 0.8$ при різних значеннях τ .

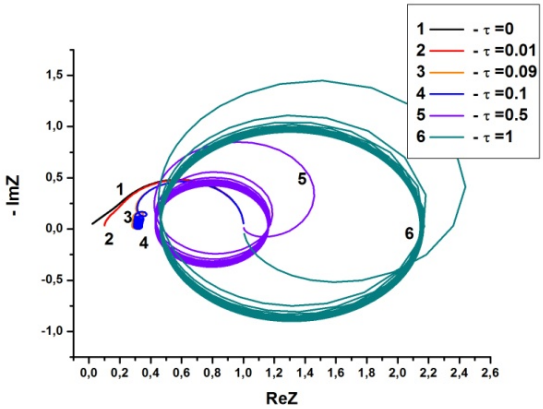


Рис. 5. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 1$ $\alpha = 1$ при різних значеннях τ .

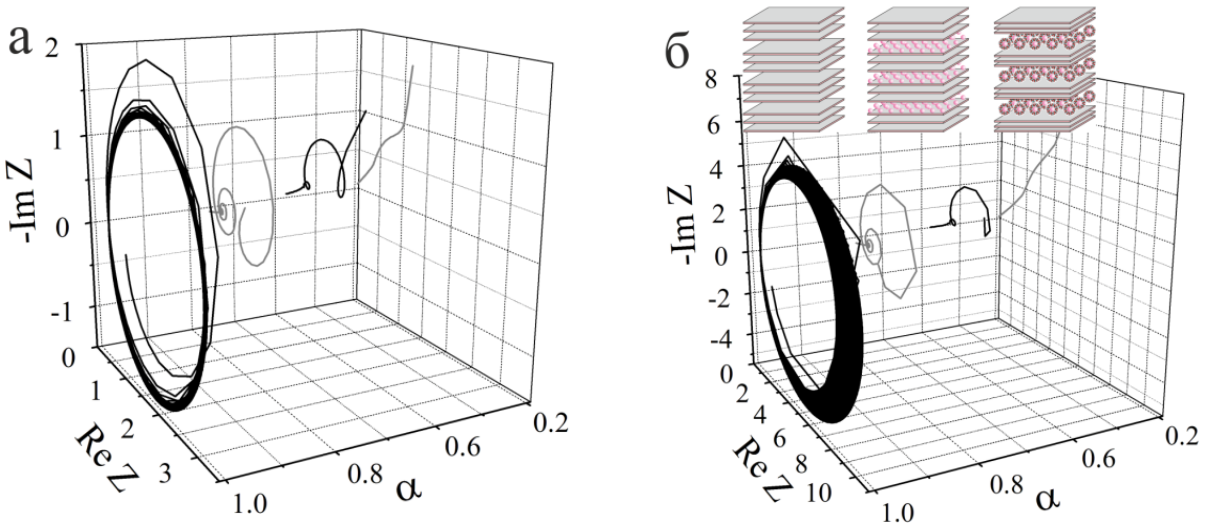


Рис. 6. Діаграми Найквіста, розраховані на основі розв’язків рівняння Кеттано для різних значень параметрів субдифузії α при часі затримки τ 1,5 (а) та 5(б).

З аналізу діаграм Найквіста (рис. 6) випливає, що ріст τ закономірно викликає ріст як дійсної, так і уявної складових імпедансу (зауважимо, що годографи імпедансу для τ=1.5÷5 практично не залежать від значення субдифузійного коефіцієнта з інтервалу D_α = 0.5÷1); при $\alpha \neq 1$ функція ImZ(α) має мінімум, а індуктивний відгук більш яскраво виражений при вищих значеннях τ при однакових значеннях α з інтервалу $0.6 < \alpha \leq 0.8$; частотна дисперсія Z($i\omega$) зростає тільки зі збільшенням α незалежно від τ; низькі значення параметра субдифузії (наприклад, $\alpha \leq 0.2$) вказують на суттєві затруднення в процесах перенесення заряду і, як наслідок – накопичення просторового заряду.

Аналіз наведених діаграм Найквіста системи GaSe з інкапсульованим β-циклодекстрином приводить до дещо неочікуваного результату: спостережуваний на експерименті [1,3] ріст частотної дисперсії годографа імпедансу при синтезі в електричному полі з одночасним освітленням зумовлений не, як очікувалося, ростом τ, а зміною часової фрактальної розмірності α. Це стосується і появи індуктивного відгуку у високочастотній області. Ріст частотної дисперсії $Z(i\omega)$ при освітленні, яке передбачає фотоіндуковану поляризацію в таких системах, також корелює, насамперед, зі зміною α. Для вияснення такої поведінки параметрів τ, α, D_α і їх вплив на імпедансні залежності необхідний розвиток мікроскопічного моделювання процесів переносу, яке б враховувало характер взаємодії носіїв заряду в мультишарових наноструктурах при дії зовнішніх полів (магнітного, електромагнітного). Така мікроскопічна теорія, викладена в [1,17], приводить до узагальнених рівнянь переносу, що описують нефіковські дифузійні процеси (в рамках статистики Рені) для носіїв заряду в мультишарових наноструктурах.

Висновки

Проведено математичне моделювання субдифузійного імпедансу та отримано якісне погодження з експериментальними дослідженнями для мультишарових наноструктур (GaSe з інкапсульованим β-циклодекстрином). Чисельне моделювання субдифузійного імпедансу на основі запропонованої математичної моделі дало можливість проаналізувати нелінійну природу явищ у мультишарових наноструктурах на основі частотної залежності дійсної та уявної частин її узагальненого опору.

Література

1. Григорчак І. І., Костробій П. П., Стасюк І. В., Токарчук М. В., Величко О. В., Іващишин Ф. О., Маркович Б. М. Фізичні процеси та їх мікро-

скопічні моделі в періодичних неорганічно/органічних клатратах. Львів, Вид. Растр-7, 2015, – 285с.: С. 276–285.
2. Klapchuk M.I., Ivashchyshyn F.O. Giant magnetoresistance effect in InSe β-CD $FeSO_4$ clatrate.// Math. Model. Comp. 2020. Vol. 7, No 2. P. 322–333 .
3. Chabecki P., Calus D., Ivashchyshyn F., Pidluzhna A., Hryhorchak O., Bordun I., Makarchuk O., Kityk A.V. Function Energy Accumulation Photo- and Magnetosensitive Hybridity in the GaSe-Based Hierarchical Structures. // Energies. 2020. Vol. 13, No 17. P. 4321.
4. Сибатов Р.Т., Учайкин В.В. Дробно-дифференциальный подход к описанию дисперсионного переноса в полупроводниках.// Усп. физ. наук. 2009. Т. 179, № 10. С. 1079–1104.
5. Сибатов Р.Т. Дробно-дифференциальная теория аномальной кинетики носителей заряда в неупорядоченных полупроводниковых системах. Автореф. дис. д.ф.-м.н., Ульяновск, 2012. 44 с.
6. Рехвиашвили С.Ш., Мамчуев М.О., Мамчуев М.О. Модель диффузионно-дрейфового транспорта носителей заряда в слоях с фрактальной структурой.// ФТТ. 2016. Т. 58, Вип. 4. С. 763–766.
7. Рехвиашвили С.Ш., Алиханов А.А. Моделирование диффузионно-дрейфового транспорта носителей заряда в полупроводниковых слоях с фрактальной структурой в переменном электрическом поле. // Физ. и тех. полупров. 2017. Т. 51, Вип. 6. С. 787–791.
8. Uchaikin V.V. Fractional Derivatives Method. Uljanovsk: Artishock-Press, 2008. 500p.
9. Fractional Dynamics. Recent Advances. (Edit. Klafter J., Lim S.C., Metzler R.). World Scientific, 2012, 530p.
10. Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., and Tokarchuk M. Generalized diffusion equation with fractional derivatives within Renyi statistics // J. Math. Phys. 2016. Vol. 57. P. 093301.
11. Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., and Tokarchuk M. Generalized electrodiffusion equation with fractality of space-time. // Math. Model. Comp. 2015. Vol. 3, No 2. P.163–172.
12. Grygorchak I. I., Ivashchyshyn F. O., Tokarchuk M. V., Pokladok N. T., Viznovych O. V. Modification of properties of GaSe β-cyclodexterin $FeSO_4$ clathrat by synthesis in superposed electric and light-wave fields. // J. Appl. Phys. 2017, Vol. 121. P. 185501(1–6).
13. Kostrobij P., Grygorchak I., Ivashchyshyn F., Markovych B., Viznovych O., Tokarchuk M. Generalized electrodiffusion equation with fractality of space–time: experiment and theory. // J. Phys. Chem. A, 2018. vol. 122. P. 4099–4110.

14. Kostrobij P.P., Markovych B.M., Viznovych O.V., Tokarchuk M.V. Generalized transport equation with nonlocality of space-time. Zubarev's NSO method. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2019. Vol. 514. P. 63–70.
15. Kostrobij P., Markovych B., Tokarchuk M., Ryzha I. Generalized diffusion equation with nonlocality of space-time: analytical and numerical analysis. 2020, arXiv:2008.10645.
16. Kostrobij P.P., Markovych B.M., Tokarchuk M.V. Generalized diffusion equation with nonlocality of space-time. Memory function modelling. // Conden. Matter Phys. 2020. Vol. 23, No 2. P.23003: 1–8.
17. Kostrobij P. P., Ivashchyshyn F.O., Markovych B. M., Tokarchuk M. V. Microscopic theory of the influence of dipole superparamagnetics (β-cyclodexterin $FeSO_4$) on current flow in semiconductor layered structures (type GaSe, InSe). // Math. Model.Comp. 2021. Vol. 8, No 1. P. 89–105.

Основні результати

Теорія механічних і теплових властивостей графену

В.М. Адамян, В.М. Бондарев, В.В. Завальнюк
(Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, кафедра теоретичної фізики та астрономії)

У наближенні двомірного пружного континууму в тривимірному просторі встановлені важливі положення теорії механічних і теплових властивостей графену: доведено, що дисперсія згинальної моди в графені є акустичної (лінійною за хвильовим вектором) внаслідок взаємодії між площинними і поза-площинними коливальними модами, які виникають при врахуванні негармонійних складових за тензором деформації в гамільтоніані коливальної підсистеми графену; знайдено явний вираз для швидкості згинального звуку в графені в залежності від пружних констант та температури разом з характеристиками зморшок на поверхні вільно висячого графену; встановлено негативне значення коефіцієнта теплового розширення графена при низьких температурах та зміну його знаку при $T \approx 1000\,\mathrm{K}$; доведено, що вільно висячий графен, досягаючи певної температури $T_m \approx 4500 - 5000\,\mathrm{K}$, яка виражається через пружні константи третього та четвертого порядку і яку можна трактувати як температуру плавлення, втрачає механічну стійкість, перестрибуючи зі стану з відносно невеликою амплітудою згинальних коливань в стан із згинальними коливаннями, які близькі за амплітудою до константи графенової решітки.

Отримані результати добре кількісно узгоджуються з даними наявних реальних експериментів і комп'ютерного моделювання в усьому інтервалі молекулярно-динамічних розрахунків.

V.M. Adamyan, V.N. Bondarev and V.V. Zavalniuk, Bending sound in graphene: origin and manifestation, Phys. Lett. A ,380, Issue 44, 11 November 2016, 3732–3737, DOI: 10.1016/j.physleta.2016.09.008

V.N. Bondarev, V.M. Adamyan and V.V. Zavalniuk, Bending mode and thermal expansion of graphene, Phys.Rev. B ***97****, 035426 (2018), doi:10.1103/PhysRevB.97.035426*

V.M. Adamyan, V.N. Bondarev and V.V. Zavalniuk, Graphene thermal break-down induced by anharmonic bending mode, J. Phys.: Condens. Matter*,* ***31*** *(2019), 465401 https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab3477*

Притягання між однойменно зарядженими макроінами

Андрій Баумкетнер
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Притягання між однойменно зарядженими макроіонами є визначальним для багатьох процесів в біології, наприклад, конденсації ДНК і відіграє важливу роль у промислових сферах застосування, наприклад, у процесах вилучення іонів з забруднених речовин у процесі біокаталізу.

Досліджено новий механізм, за допомогою якого можна реалізувати притягання між сферичними макроіонами, зануреними в середовище з високою іонною силою. Притягання проявляється як мінімум в макроіонному потенціалі середньої сили на невеликих відстанях та передається з високою статистичною ймовірністю через специфічні конфігурації двох, трьох і більше протиіонів, що зявляються між макроінами. Ілюстрація отриманого ефекту приведена на Рис. 1. Глибина мінімуму потенціалу збільшується із зарядом макроіона, демонструючи, що притягання має електростатичний характер.

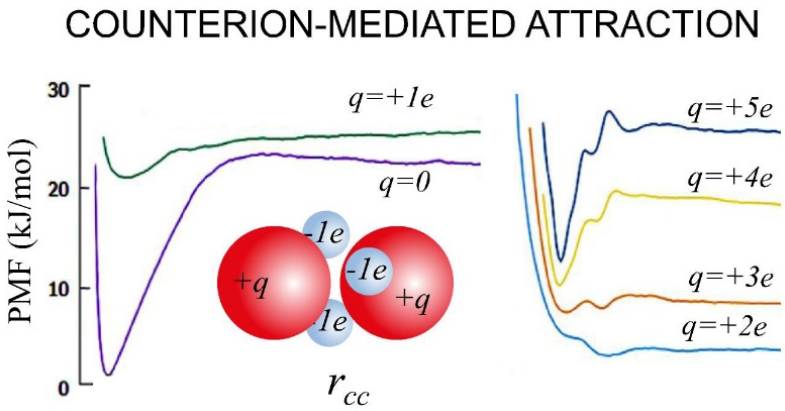


Рис. 1. Потенціал середньої сили як функція відстані між колоїдами. При зростанні заряду до *+3e* і вище між частинками спостерігається притягання.

Показано, що неявна модель розчинника в якій діелектрична проникність залежить від відстані добре описує як геометрію так і термодинаміку утворення димерів. Результати, отримані для моделі колоїду з гладкою поверхнею екстраполюються на більш реалістичні системи. Приведено докази, що знайдений механізм притягання можна спостерігати в невеликих хімічних сполуках з інкапсульованими іонами, такі як фулерени [1].

Stelmakh A., Cai W., Baumketner A. Attraction between Like-Charged Macroions Mediated by Specific Counterion Configurations // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2019. Vol. 123, no. 46. P. 9971–9983.

Кластерні кристали

Андрій Баумкетнер
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Кластерами називаються мультимери, що виникають в результаті асоціації мономерів у різноманітних м'яких матеріалах. В процесі самоасоціації кластери також можуть формувати складніші мезоскопічні структури, такі як ламели, суперґратки з одновимірних колоїдних колонок та кластерні кристали. Останні являють собою впорядковані ґраткові структури, на кожному вузлі яких знаходяться кластери. Вперше такі структури були помічені в системах, які взаємодіють через відштовхувальний сходинковий потенціал, який дозволяє взаємний перетин частинок. Системи, що складаються з частинок скінченого розміру, теж можуть утворювати кластерні кристали. Проте на даний час такі системи є дуже слабо дослідженими.

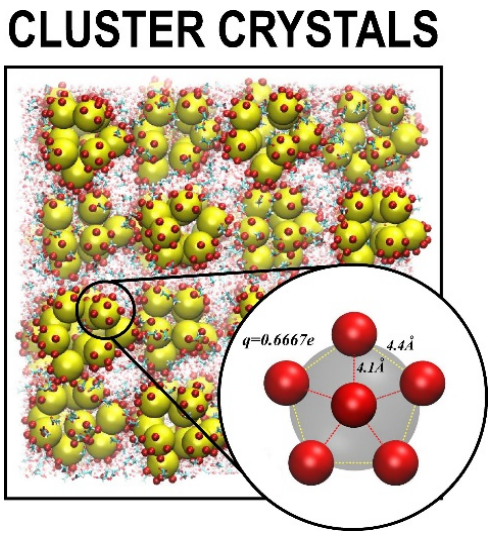


Рис. 1. Модель колоїду з гідрофобними та електростатичними взаємодіями запроваджена в даній роботі, яка утворює кластерний кристал.

Нами поставлено завдання з'ясувати за яких умов кластерні кристали можуть утворюватися з частинок скінченого розміру, що взаємодіють через електростатичні та гідрофобні взаємодії. Для кімнатної температури параметри необхідних потенціалів були визначені за допомогою аналітичної моделі, запровадженої в попередніх роботах щодо кластерів. Шляхом комбінаторного пошуку знайдено кілька систем гідрофобних заряджених частинок зі змінним розміром, які потенційно можуть утворювати стабільні кристали при $T = 300$ K. Найпростішими для реалізації та тестування виявились системи, які несуть великий заряд, що розпорошений на поверхні частинки. Для однієї такої системи, проілюстрованої на Рис. 1, проведено тестові симуляції кристалів у явному розчиннику для змінного T. Згідно з передбаченнями, при низьких температурах кластер виявився стабільним, тоді як при великих – плавився. Таким чином було знайдено прототип системи зі скінченим розміром, яка потенційно може утворювати кластерні кристали.

Baumketner A., Stelmakh A., Cai W. Cluster Crystals Stabilized by Hydrophobic and Electrostatic Interactions // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2018. Vol. 122, no. 9. P. 2669–2682.

Транспорт електронів на великі відстані через альфа-спіралі

Л.С. Брижик
(Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України)

Виведено систему рівнянь, що описує квазічастинку (надлишковий електрон, дірку або молекулярне збудження, екситон) у системі «Донор – Альфа-спіральна білкова молекула – Акцептор» з урахуванням електрон-фононної взаємодії. Методом чисельного розв'язування дискретних нелінійних рівнянь доведено, що в широкому інтервалі значень параметрів донора, акцептора та молекулярного ланцюжка має місце тунелювання квазічастинки з донора на кінцеву групу ланцюжка. На цьому етапі квазічастинка тунелює на сусідні групи ланцюжка і за певних умов за досить короткий проміжок часу вона автолокалізується в області, що охоплює декілька елементарних комірок ланцюжка, за рахунок створення локальної деформації ланцюжка. В такому стані, відомому як Давидовський солітон, квазічастинка продовжує рухатися до протилежного кінця ланцюжка з постійною швидкістю та майже без дисипації енергії. Коли значна частина ймовірності хвильової функції квазічастинки досягає протилежного кінця альфа-спіралі, квазічастинка за короткий проміжок часу тунелює на акцептор (див. Рис. 1). Знайдено оптимальні значення параметрів системи для такого процесу та доведено його стійкість для характерних параметрів альфа-спіральних білкових молекул при фізіологічних температурах. Таким чином доведено можливість транспорту зарядів, енергії та інформації в такій системі від донора до акцептора на макроскопічну відстань за рахунок автолокалізації електрона і утворення солітон-подібного стану в альфа-спіралі. Проаналізовано також вплив наявності дисипації енергії в системі за рахунок тертя та показано, що ймовірність перенесення квазічастинки від донора до акцептора слабко залежить від коефіцієнту тертя.

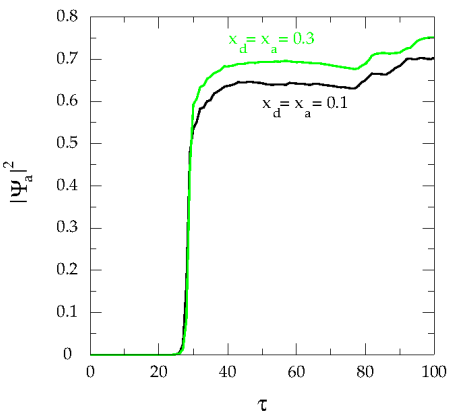


Рис.1. Ймовірність присутності квазічастинки на молекулі акцептора як функція часу (в безрозмірних одиницях) для двох значень сталих електрон-фононного зв'язку між донором (акцептором) та ланцюжком (в одиницях сталої електрон-фононного зв'язку в ланцюжку).

Ці результати становлять першу теоретичну модель, що пояснює експериментально встановлену так звану «гіперпровідність» (електропровідність на макроскопічну відстань при кімнатих температурах) в складних гетеросистемах типу «донор – полімер – акцептор» , що використовуються в приладах біоелектроніки (наприклад, фотовольтаїчні елементи, світлодіоди), «fuel cell» технологіях та ін., що базуються на метало-органічних системах або структурах, що є комплексами електропровідних матеріалів або підкладок та поліпептидів.

L.S. Brizhik, Jingxi Luo, B.M.A.G. Piette, W.J. Zakrzewski. "Long-range electron transport mediated by alpha-helices", Phys. Rev. E, ***100****, 062205 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevE.100.062205;*
L.S. Brizhik, Jingxi Luo, B.M.A.G. Piette, W.J. Zakrzewski. "Long-range electron transport mediated by alpha-helices", ArXiv:1909.08266v1[cond-mat-other] 18 Sept 2019.

Вплив ангармонізму та електрон-фононної взаємодії на транспорт електронів у низькорозмірних системах

Л.С. Брижик
(Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України)

Досліджено проблему транспорту електронів у низькорозмірних системах з оптичною модою дисперсійних фононів із врахуванням ангармонізму коливань ґратки та електрон-фононної взаємодії. В лінійному наближенні така система допускає розв'язок у вигляді полярона Холстейна. У випадку помірної і сильної електрон-фононної взаємодії лінійне наближення несправедливе і таку задачу слід розглядати як істотно нелінійну. Отримані нелінійні рівняння розв'язано методом чисельного моделювання і показано, що в широкому інтервалі значень параметрів ланцюжка надлишковий електрон автолокалізується і розповсюджується вздовж ланцюжка у вигляді біжучої хвилі. Варіаційним методом в довгохвильовому наближенні показано, що відповідна система нелінійних рівнянь допускає як мінімум три типи автолокалізованих солітон-подібних стани. Знайдено аналітичні вирази цих солітонів. Два з них є солітонами Холстейна і виглядають як дзвін-подібні пакети з одним максимумом ймовірності густини заряду, в той час як третій тип є солітоном, огинаюча якого має два максимуми (Рис. 1).

Варіаційним методом відтворено точні форми всіх трьох типів солітонів і передбачено існування трьох спектральних гілок для відповідних трьох типів солітонів. Існування цих аналітично точних розв'язків підтерджено методами комп'ютерного моделювання для відмінних від нуля швидкостей

солітонів. Таким чином, чисельними та аналітичними методами доведено можливість автолокалізації електронів у нелінійній системі, що описує ланцюжок з оптичними фононами з відмінною від нуля дисперсією та ангармонізмом коливань ґратки. Знайдено значення параметрів системи, коли її найнижчому електронному стану відповідає солітон-подібний автолокалізований стан. Доведено, що в ангармонічних ґратках солітони можуть рухатися зі скінченою швидкістю як у випадку наявності дисперсії фононів, так і за її відсутності. Ці результати якісно узгоджуються з висновком про існування поляронних стаціонарних станів в моделі Пейрара-Бішопа-Холстейна, що описує ланцюжки з потенціалом Морзе для взаємодії на вузлах та експоненційно-спадним потенціалом взаємодії між найближчими сусідами. Запропонована модель є першою, що доводить існування солітонних розв'язків, які можуть рухатися зі скінченною швидкістю, в ланцюжках з оптичною фононною модою ангармонічних коливань ґратки. Ці результати значно розширюють сферу застосувань Давидовських солітонів. Вони важливі для опису процесів транспорту заряду та енергії як в макромолекулах, так і в електропровідних полімерах та квазі-одновимірних системах, до яких відносяться також і високотемпературні надпровідні системи, графен та інші, в яких оптичні фонони, їх дисперсія та ангармонізм, а також електрон-фононна взаємодія є істотними.

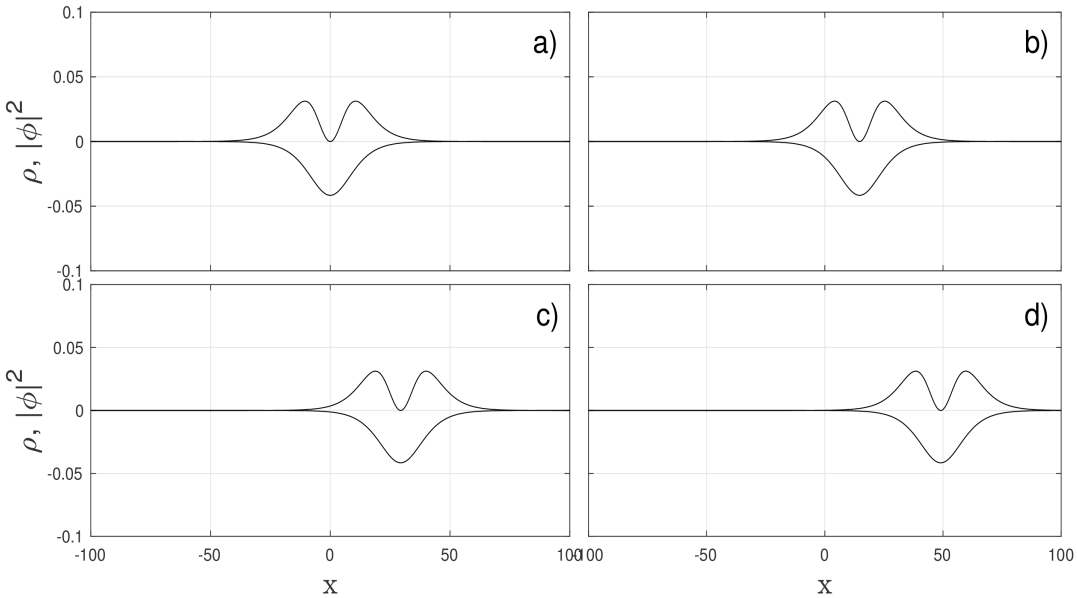


Рис 1. Солітон Холстейна III роду як функція положення в ланцюжку для різних моментів часу: a) t_1, b) t_2, c) t_3, d) t_4, де $t_1 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4$. Верхні криві описують густину заряду, нижні криві описують деформацію ланцюжка.

L. A. Cisneros-Ake, L. Brizhik. Energy transfer by Holstein solitons in a one-dimensional anharmonic continuum medium. Chaos, Sol. and Fractals, ***119****, 343–354 (2019), DOI: 10.1016/j.chaos.2018.12.025.*

Природа низької в'язкості в твердому ядрі Землі

Т.М. Брик
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Геофізичні задачі про структуру і динамічні явища в ядрі Землі та в його зовнішній розплавленій оболонці актуальні як для розуміння фізики формування планет, так і для вивчення стійкості матеріалів в екстремальних умовах високих температур і тисків. Експериментальні дослідження структури ядра Землі обмежено спостереженнями сейсмічних хвиль, тоді як комп'ютерне моделювання відкриває широкі можливості для аналізу мікроскопічних процесів за різних умов. Із використанням такого моделювання, що базується на комбінації першопринципної молекулярної динаміки та підходу EAM (embedded atom model), науковці дослідили динамічні процеси, які мають місце в кристалічному залізі за температур і тисків, що характерні для внутрішнього ядра Землі (T ~ 6000–7000 K, P ~ 320–360 ГПа). Було показано, що за температур вище 6500 K частина атомів заліза здійснює кооперативні перескоки між сусідніми положеннями рівноваги в площині (110) об'ємно-центрованої кубічної структури, відомі у фізиці твердого тіла як кільцевий обмін атомів. Це зумовлює новий механізм згасання звукових збуджень, що фіксувалося за поведінкою часових кореляційних функцій «густина-густина».

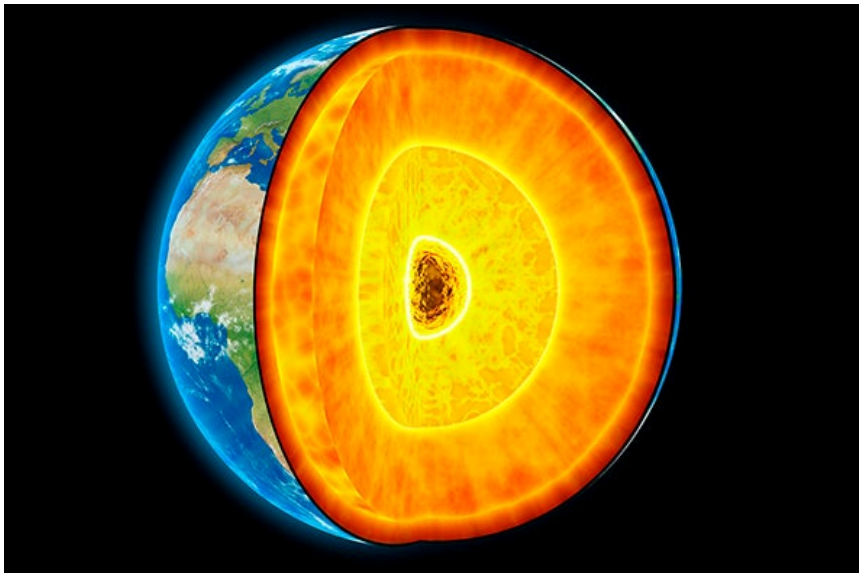


Рис. 1. Структура Землі з твердим ядром.

Отримані залежності середньо-квадратичних зміщень атомів і виконані розрахунки відповідних коефіцієнтів дифузії дали змогу пояснити спостережуване в сейсмічних хвилях згасання та оцінити в'язкість заліза в

ядрі Землі. Зокрема, було показано, що в'язкість заліза за температур і тисків, які характерні для ядра Землі, є низькою саме через кооперативні перескоки атомів, які породжують процеси дифузії.

Belonoshko A.B., Fu J., Bryk T., Simak S.I., Mattesini M. Low viscosity of the Earth's inner core // Nature Commun. 10 (2019) 2483: 1–7.

Особливості флуктуацій зарядової густини в області переходу від молекулярного до атомарного водневого флюїду при високих тисках

Т.М. Брик
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

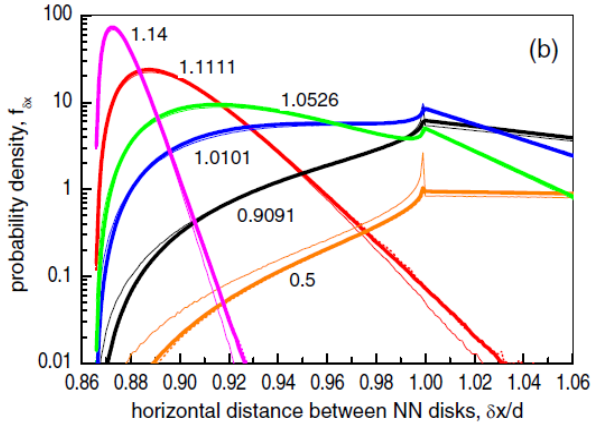
Комп'ютерним моделюванням на основі першопринципної молекулярної динаміки встановлено особливості атомарної структури та просторового розподілу зарядової густини у водневому флюїді в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду при температурі 2500 К. Аналітично показано, що довгохвильова асимптотика структурного фактора зарядової густини для випадків чисто молекулярного водню (малі тиски) та металічного водневого флюїду (надвисокі тиски) повинна бути пропорційна четвертій степені за хвильовим числом $\sim k^4$, що і було підтверджено в першопринципному комп'ютерному моделюванні. Однак, в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду спостерігається різка зміна довгохвильової асимптотики структурного фактора зарядової густини, що виникає внаслідок сильних флуктуацій електронної густини, що впливає на екранування протонів. Як наслідок, структурний фактор зарядової густини в області переходу отримує внесок від іонної компоненти, яка має довгохвильову асимптотику $\sim k^2$. Результати першопринципного моделювання вперше дозволили обґрунтувати припущення, що в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду можуть існувати не повністю заекрановані іони, що відображається в особливостях структури та динаміки водневого флюїду в перехідній області.

T. Bryk, C. Pierleoni, G. Ruocco, A.P. Seitsonen. Characterization of molecular-atomic transformation in fluid hydrogen under pressure via long-wavelength asymptote of charge density fluctuations // J. Molec. Liq. v. 312, 113274 (2020).

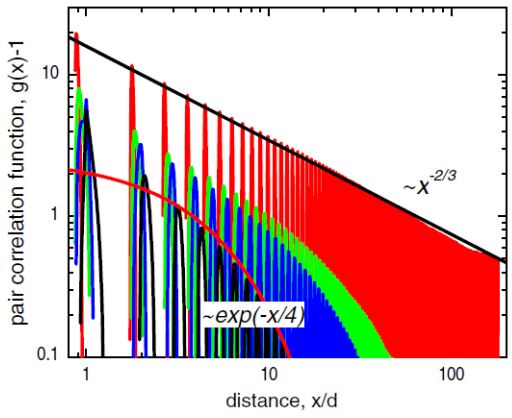
Перехід скування – відкування в квазі-одновимірній системі твердих дисків є типу переходу Костерліца–Таулеса у двовимірних системах

Т. Брик [1)], А. Трохимчук [1)], В. Пергаменщик [2)]
([1)] Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
[2)] Інститут фізики НАН України)

Неперервний перехід Костерліца–Таулеса в двовимірних системах відбувається через утворення пар дефектів, які за високої температури розпадаються і система стає рідиною. У щільній квазі–одновимірній системі (q1D, вузька двовимірна пора) твердих дисків (ТД), яка близька до кристалічного зиґзаґу, сусідні диски сковують один одного і через це їхній рух дуже обмежено. Коли густина падає, деякі диски частково звільняються, відбувається відкування. Поєднанням методів молекулярної динаміки і аналітичної теорії в роботах [1–3] показано, що перехід зиґзаґ–рідина в q1D системі ТД йде за сценарієм Костерліца–Таулеса. У щільному зиґзаґу утворюються вікна–дефекти, крізь які диски обмінюються положеннями поперек пори. Ці дефекти мають чисто ентропійне походження і їх розподіл, на відміну від звичайних, не описується Больцманівською експонентою. Кількість цих дефектів росте, коли густина падає, що в решті решт приводить до плавлення зиґзаґу і рідинного стану. Чисельно отримана кореляційна функція системи для малих густин спадає експоненційно, а вище певної густини (1.056) – як степінь відстані. Це є головною ознакою переходу Костерліца–Таулеса, що вперше вказує на можливість таких переходів в розмірності меншій двох, тобто в q1D системах.



Розподіл повздовжніх відстаней між дисками для різних густин. Піки на відстані одного діаметру d є вікнами в зиґзаґу, бо через них скутий диск може просунутись між сусідами.



Квазі-далекосяжний порядок: кореляції спадають степенево вище густини 1.056.

1. A. Huerta, T. Bryk , V. M. Pergamenshchik, and A. Trokhymchuk, Kosterlitz-Thouless-type caging-uncaging transition in a quasi-one-dimensional hard disk system, Phys. Rev. Research, **2**, 033351 (2020).
2**.** A. Huerta, T. Bryk, and A. Trokhymchuk, Transverse excitations and zigzag transition in quasi-1D hard-disk system, arXiv:1904.05970 (2019).
3. V. M. Pergamenshchik, Analytical canonical partition function of a quasi-one-dimensional system of hard disks, J. Chem. Phys. **153**, 144111 (2020).

Квантова динаміка взаємодіючих надплинних потоків в атомарних Бозе-конденсатах

С. Вільчинський, О. Челпанова, Є. Курятніков, А. Якименко
(Київський національний університет імені Тараса Шевченка, кафедра квантової теорії поля)

В [1] теоретично досліджено взаємодію надплинних потоків ультрахолодних атомарних Бозе-Ейнштейнівських конденсатів у коаксіальних вертикально з'єднаних тороїдальних пастках. В режимі слабкого зв'язку досліджено аналог ефекту Джозефсона.

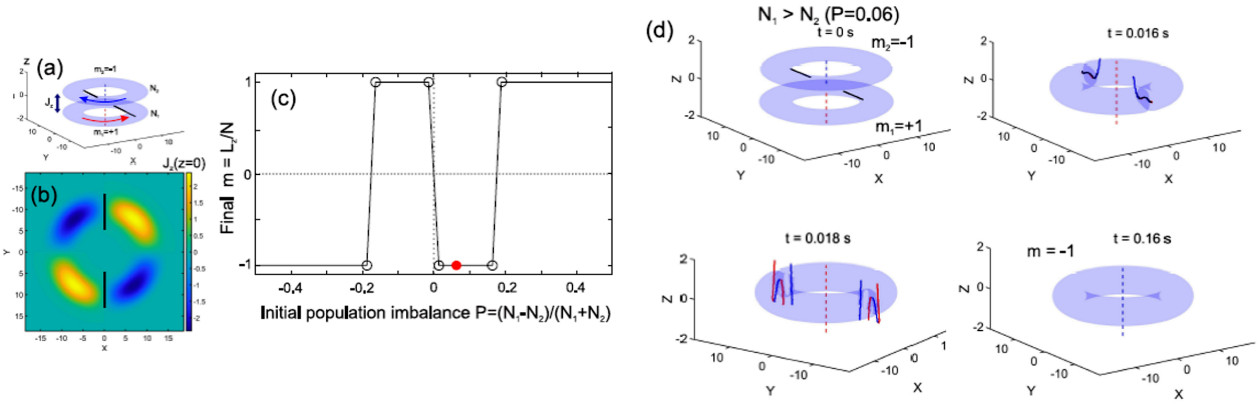


Рис. 1. Зв'язані коаксіальні тороїдальні атомарні конденсати з протилежно направленими надплинними потоками. (a) Вертикальні червоні та сині пунктирні лінії позначають кори вихрових ліній, що відповідають стійким надплинним потокам. Джозефсонівські вихори позначені суцільними чорними лініями. (b) Густини тунельного потоку через бар'єр, $J_z(x,y,z = 0)$. (c) Рівноважне значення загального кутового моменту на частинку L_z/N, що зливаються як функція початкового дисбалансу кількості атомів $P = (N_1 - N_2)/(N_1+N_2)$. (d) Еволюція злиття надплинних потоків. Бар'єр, що розділяє два кільця вимикається при $t > t_d = 0.015$ с. Червоні (сині) лінії вказують положення вихрового (антивихрового) кору. Кількість атомів у нижньому кільці з вихором $m_1 = +1$ більша, ніж у верхньому, з антивихором $m_2 = -1$ [початковий дисбаланс, $P = 0.06$, позначено червоною точкою у (c)]. Симетричний дрейф двох діаметрально протилежних вихрових збуджень у напрямку до центру тору, що призводить до подальшого знищення центрального вихору та релаксації тороїдального конденсату в кінцевий стан із топологічним зарядом $m = -1$.

Показано, що тунельний потік має азимутальну структуру, що призводить до формування Джозефсонівських вихорів в області бар'єру, що розділює конденсати. Виявлено, що завдяки азимутальній симетрії повний

тунельний потік між протилежно направленими надплинними потоками рівний нулю. Теоретично передбачено, що процес злиття та релаксації надплинних потоків супроводжується симетричною динамікою квантових вихорів. Показано, що на відміну від класичних систем, квантовані протилежно направлені симетричні потоки при злитті не релаксують до стану з нульовим кутовим моментом. Запропоновано методи генерації надплинних потоків із різними топологічними зарядами, що можуть бути реалізовані в існуючих експериментальних умовах.

1. Chelpanova O., Kuriatnikov Y., Yakimenko A., Vilchinskii S. Spatiotemporal flow rings in atomic Bose-Einstein condensates. Low Temperature Physics, 2019, 45 (8) 908–913.

Акустичний аналог випромінення Хокінга в квантованих потоках атомарних Бозе-конденсатів

С. Вільчинський, В. Білошицький, О. Челпанова, А. Олійник, А. Якименко
(Київський національний університет імені Тараса Шевченка, кафедра квантової теорії поля)

Чорні діри – найдивовижніші об’єкти у Всесвіті, що можуть допомогти розкрити загадки зв’язку між гравітацією та квантовою теорією. Яскравим проявом квантових властивостей полів поблизу чорних дір є випромінення Хокінга. Однак температура випромінення Хокінга для астрофізичних чорних дір є вкрай низькою, що робить пряме спостереження цього ефекту практично неможливим. В піонерській роботі Унру [1] було доведено формальну еквівалентність між поведінкою акустичної хвилі в рідині або газі та скалярним полем у викривленому просторі-часі. Ця ідея дозволила експериментально спостерігати акустичні аналоги випромінення Хокінга в різноманітних фізичних системах. У [2] досліджено можливість спостереження акустичних аналогів випромінення Хокінга в кільцеподібному Бозе-конденсаті. На Рис. 1 схематично зображено тороїдальний конденсат із постійною швидкістю потоку (синя лінія) та змінною локальною швидкістю звуку (чорна лінія). Було продемонстровано, що в системі з нерівномірною локальною швидкістю звуку стабілізується нестабільність у надзвуковій області плавним ґрадієнтом на горизонті білих дір. Встановлено, що кореляційні функції щільності і щільності, що представляють собою акустичний аналог ефекту Хокінга, сильно впливають на радіус кільцеподібної конфігурації та кількість дискретних акустичних мод, що можуть збуджуватись в такому конденсаті. Виявлено, що випромінювання Хокінга не

генерується, якщо радіус кільця опускається нижче критичного значення. Отримані результати можуть бути використані при аналізі випромінення Хокінга в астрофізичних чорних дірах та задачі про стабільність первинних чорних дір Планківських масштабів у квантовій гравітації.

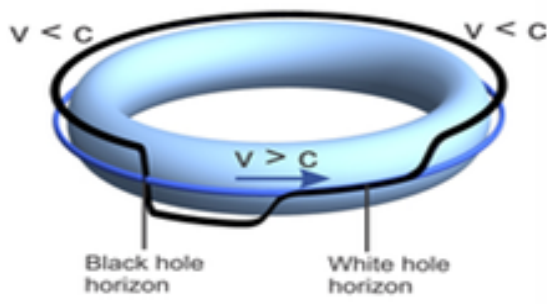


Рис. 1. Схема кільцеподібного Бозе-конденсату з асиметричними горизонтами подій. Блакитним кольором показано поверхню сталої густини конденсату з постійною швидкістю надплинного потоку v (синя лінія). Азимутально-модульована константа взаємодії бозе-атомів відповідає змінній локальній швидкості звуку $c(x)$ (чорна лінія). Стрілкою вказано напрямок надплинного потоку. Акустичні аналоги горизонтів чорної і білої діри знаходяться в області, де швидкість потоку досягає значення локальної швидкості звуку $c(x) = v$.

1. Unruh W. G. Experimental Black-Hole Evaporation? Phys. Rev. Lett. 46, 1351 (1981).
2. Beloshitskii V., Chelpanova O., Oliynyk A., Yakimenko A., Vilchinskii S. Analogues of Josephson junctions and black hole event horizons in atomic BEC. Low Temperature Physics, 2018, 44(10).

Самоусереднення у двовимірній моделі Ізінґа з випадковими замороженими феромагнітними зв'язками

Ю. Головач, М. Дудка
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Двовимірна модель (2D) Ізінґа із замороженими (quenched) випадковими феромагнітними зв'язками є однією з архетипних моделей при вивченні критичної поведінки структурно-невпорядкованих та аморфних магнетиків. Ця робота присвячена дослідженню питання про самоусереднення спостережуваних термодинамічних величин, що характеризують критичну поведінку такої моделі. Відомо, що спричинені структурним безладом флуктуації в деяких випадках можуть привести до втрати самоусереднення: поведінка великого зразка з конкретною реалізацією домішок, такого як реальний зразок матеріалу в лабораторії, не буде добре описана середнім за ансамблем значенням, що, як правило, обчислюється в аналітичному або числовому підході. А це, в свою чергу, матиме глибокі наслідки для фізичної інтерпретації результатів та можливостей порівняння теоретичних та експериментальних результатів. В попередній роботі (V. Dotsenko, Yu. Holovatch. *Phys. Rev. E* **90** (2014) 052126) показано відсутність самоусереднення в критичній ділянці для вільної енергії 2D моделі Ізінга зі замороженими випадковими феромагнітними зв'язками. В цій роботі продовжено розпочаті дослідження. Застосовуючи метод реплік і підхід теоретико-польової ренормалізаційної групи, отримано явні вирази для функції розподілу ймовірностей внутрішньої енергії та питомої теплоємності в критичній ділянці. З отриманих результатів слідує, що розподіл за структурним безладом для внутрішньої енергії є гауссовим, і типові флуктуації між зразками, а також середнє значення змінюються з розміром системи як $\sim L \ln \ln(L)$. На відміну від такої поведінки, питома теплоємність є самоусереднюваною величиною з функцією розподілу, що прямує до δ-піку в термодинамічній границі $L \to \infty$. Раніше було виявлено відсутність самоусереднення для вільної енергії, в цій роботі отримано результати для величин, які можна безпосередньо виміряти в комп'ютерних симуляціях і обсуджено наслідки для вимірювань у реальних системах.

Victor Dotsenko, Yurij Holovatch, Maxym Dudka, Martin Weigel. Self-averaging in the random 2D Ising ferromagnet. *Phys. Rev. E* 95 (2017) 032118.

До можливості неперервного фазового переходу в моделі магнетика з випадковою анізотропією

Ю. Головач, М. Дудка, Д. Шаповал
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

До магнітних систем, які можна описати моделлю із випадковою анізотропією (RAM), належить широкий клас аморфних матеріалів, зокрема за допомогою RAM описують властивості сплавів типу рідкісна земля-перехідний метал. У нашій роботі досліджується, як критичні властивості RAM залежать від розподілу осі локальної анізотропії. Розглянуто найбільш загальний випадок випадкової локальної анізотропії, що включає, зокрема, випадки ізотропного розподілу та розподілу вздовж осей гіперкуба. Попередні дослідження для такої системи передбачають існування феромагнітного впорядкування при вимірності простору $D = 3$. Ми розглянули цю задачу із використанням двох різних варіантів методу теоретико-польової ренормалізаційної групи і показали помилковість таких передбачень. Обидва методи дають узгодження, які виключають можливість неперервного фазового переходу в цій моделі, тобто відсутність феромагнітного впорядкування у досліджуваній системі.

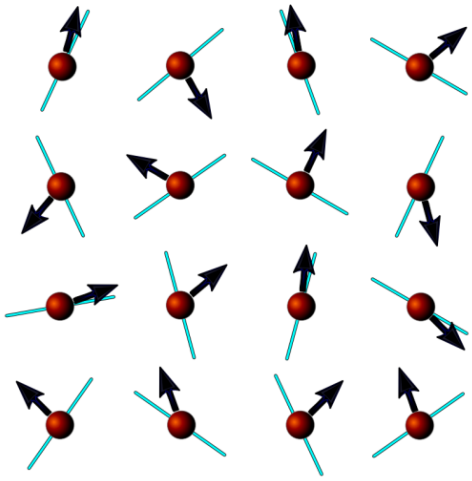


Рис. 1. Двовимірна RAM. Червоні диски зображують вузли гратки із спінами (чорні стрілки). Випадкові локальні напрямки осі анізотропії на кожному вузлі показані світло-синьою лінією.

Dmytro Shapoval, Maxym Dudka, Andrei A. Fedorenko, Yurij Holovatch. On the possibility of a continuous phase transition in the random anisotropy magnets with a generic random axis distribution. *Phys. Rev. B* vol. 101 (2020) 064402.

Суперіонна рідина в провідній ультратонкій плоскій порі

М. Дудка
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Розглянуто поведінку суперіонних рідин у провідній ультратонкій плоскій порі, що дозволяє тільки один шар іонів, використовуючи трикомпонентну ґраткову модель. Аналітичні розрахунки, виконані у наближенні ґратки Бете, показали існування багатої фазової діаграми для обмеженої іонної рідини в термінах параметрів, що характеризують систему: іонофільність пори, міжіонна взаємодія та прикладена напруга. Фазова діаграма включає лінії прямих і зворотніх фазових переходів першого і другого роду між «впорядкованою» та «невпорядкованою» фазами. Невпорядкована фаза представляє собою однорідну суміш контріонів та пустот, а впорядкована фаза означає, що іони одного типу переважно займають одну з двох підґраток. Для випадків іонофобної та іонофільної пори отримано залежності заряду, ємності, повної густини іонів та параметра перезарядки як функцій прикладеної напруги (Рис. 1).

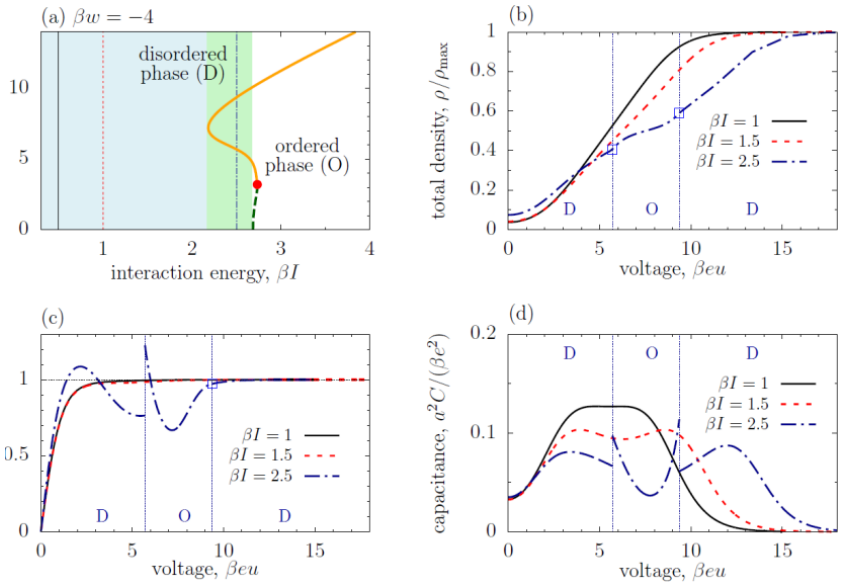


Рис. 1. Результати для іонофобної пори з βw=–4, де β – обернена температура, w – параметр іонофільності. a) Фазова діаграма в площині прикладеної напруги u і енергії міжіонної взаємодії I, де впорядкована (O) і невпорядкована (D) фази розділені лініями фазових переходів другого роду (суцільна лінія), та фазових переходів першого роду (штрихова лінія), які зустрічаються в трикритичній точці (позначеній кругом). Тонкі вертикальні лінії показують значення βI, що використовуються в (b–d). (b) Повна густина іонів, (c) параметр зарядки та (d) ємність для трьох вибраних значень βI. Квадрати і тонкі вертикальні лінії показують положення фазового переходу при $\beta I = 2.5$.

M. Dudka, S. Kondrat, O. Bénichou, A. A. Kornyshev, G. Oshanin, Superionic liquids in conducting nanoslits: A variety of phase transitions and ensuing charging behavior. *J. Chem. Phys.* **151**, 184105 (2019)

Кінетика низькотемпературного газу водневоподібних атомів у зовнішньому електромагнітному полі

А.Г. Загородній [1)], Ю.В. Слюсаренко [2)], О.Ю. Слюсаренко [2)], С.М. Шульга [2)]
([1)] Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова НАН України,
[2)] Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України)

Розвинуто мікроскопічний підхід до послідовної побудови кінетичної теорії низькотемпературних розріджених газів воднеподібних атомів у зовнішньому електромагнітному полі. Підхід базується на формулюваннях методу вторинного квантування за наявності зв'язаних станів частинок. Вважається, що зв'язаний стан (наприклад, воднеподібний атом лужного металу) формується двома зарядженими ферміонами різних сортів – валентним електроном та остовом. В основу виведення кінетичних рівнянь покладено метод скороченого опису релаксаційних процесів. У рамках розвинутого підходу здобуто систему кінетичних рівнянь для вігнерівських функцій розподілу вільних ферміонів обох сортів та їх зв'язаних станів – воднеподібних атомів із урахуванням впливу на систему зовнішнього й самоузгодженого (середнього) полів. Одержані рівняння руху для вігнерівських функцій розподілу повинні слугувати основою для аналізу нерівноважних ефектів та явищ, пов'язаних зі впливом зовнішнього електромагнітного поля на низькотемпературні гази лужних металів.

1. Yu.V. Slyusarenko, O.Yu. Sliusarenko, Journal of Mathematical Physics, **58**, (2017) 113302.
2. A.G. Zagorodny, Yu.V. Slyusarenko, and S.N. Shulga, Low Temperature Physics, **44**, (2018) 1049; doi: 10.1063/1.5055846.

Комп'ютерне моделювання гелеутворення та адсорбції в системі декорованих наночастинок

Я.М. Ільницький
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Виконане моделювання наночастинок (НЧ), плямисто-декорованих рідкокристалічними лігандами у виді полярного, три- та чотирифункціонального, екваторіального та ікосаедричного каркасів. Використовуючи метод мезоскопічної молекулярної динаміки досліджено агрегацію таких НЧ декорованих частинок у порі зі стінками, модифікованими шаром заморожених недекорованих НЧ, а об'єм заповнений полярним розчинником. Ліганди формують фізичні перехресні зв'язки між НЧ завдяки сильній рідкокристалічній (РК) взаємодії між ними, сприяючи формуванню наногелю. Досліджено динаміку гелеутворення та низку характеристик, що описують властивості гелю як мережі, залежно від типу декоруючого каркасу та концентрації наночастинок. Основний акцент дослідження – на передбаченні оптимального типу декоруючого каркасу та концентрації наночастинок із метою формування однорідного механічно стійкого матеріалу з потенційним застосуванням для потреб каталізу. Ілюстрація – Рис. 1.

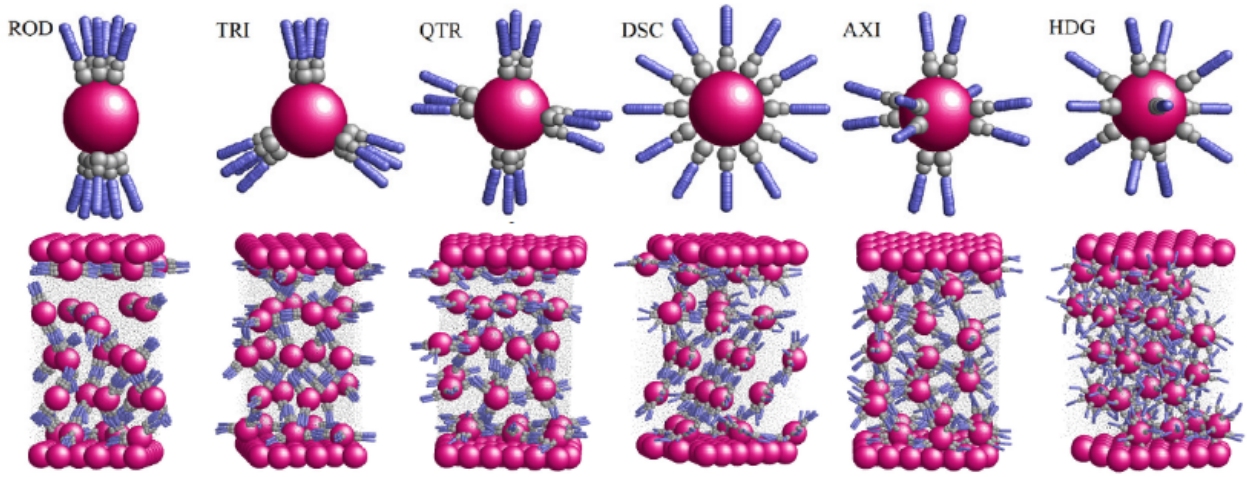


Рис. 1. Зліва: верхній ряд: НЧ з різними декоруючими паттернами, нижній ряд: структура утвореного ними наногелю.

Досліджено систему НЧ, декорованих лігандами з РК-групами, які поміщені в пору з нижньою поверхнею (Z=0) у виді полімерної РК щітки. Комп'ютерне моделювання та аналіз профілів густини НЧ вздовж осі Z за різної кількості молекул щітки N_B встановили існування оптимального значення N_B, при якому спостерігається найінтенсивніша адсорбція НЧ у верхній частині полімерної щітки, а отже формування метаматеріалу НЧ-

щітка. З подальшим ростом щільності щітки вона утримує частину НЧ в собі (які випадково розподілені в просторі), а решта виштовхуються назовні в об'ємну область. Досліджено також локальну динаміку НЧ у різних областях модельної комірки. Дослідження спрямовані на вивчення особливостей РК щітки як функціонального матеріалу, здатного адсорбувати НЧ, які декоровані специфічними групами, в майбутньому планується розгляд фотокерованої адсорбції. Ілюстрація – Рис. 2.

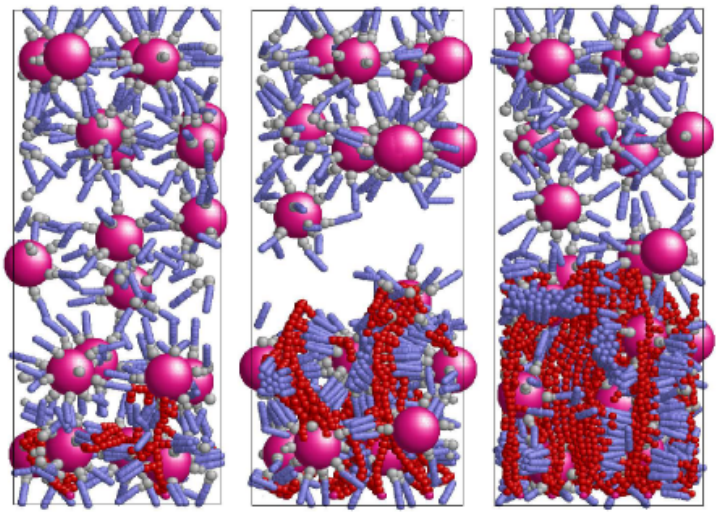


Рис. 2. Адсорбція НЧ на рідкокристалічній щітці, середній малюнок відповідає оптимальним умовам адсорбції.

1. J. Ilnytskyi, A. Slyusarchuk, M. Saphiannikova, Photocontrollable Self-Assembly of Azobenzene-Decorated Nanoparticles in Bulk: Computer Simulation Study, Macromolecules, Vol.49, Iss. 23, pp. 9272–9282 (2016), DOI: 10.1021/acs.macromol.6b01871
2. J.M. Ilnytskyi, A. Slyusarchuk, S. Sokołowski, Gelation of patchy ligand shell nanoparticles decorated by liquid-crystalline ligands: computer simulation study, Soft Matter, Vol. 14, pp. 3799–3810 (2018), DOI: 10.1039/C8SM00356D
3. A.Y. Slyusarchuk, D.L. Yaremchuk, J.M. Ilnytskyi, Adsorption of decorated nanoparticles on a liquid crystalline polymer brush: molecular dynamics study, Mathematical Modeling and Computing, Vol. 7, No. 2, pp. 207–218 (2020). DOI: 10.23939/mmc2020.02.207

Властивості форми мезоскопічних розгалужених полімерів та їх агрегатів

Я.М. Ільницький
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Проведено аналіз характеристик форми гомогенних та гетерогенних зіркоподібних молекул (Рис.1, верхній ряд) у розчині за різної якості розчинника. Дослідження виконане за допомогою мезоскопічного підходу дисипативної динаміки. Для усіх типів зірок радіус ґірації зменшується зі збільшенням ступеня відштовхування між сольвофобними мономерами та розчинником, вказуючи на колапс частини або всіх гілок зірки. Цей стан характеризується впакуванням, близьким до щільного тривимірного впаку–ван–ня твердих сфер. Виявлено цікавий ефект: асферичність гомогенної зірки досягає максимуму, коли властивості розчинника моделюють θ-точку. Це пояснюється конкуренцією між ентальпійним та ентропійним вкладами до вільної енергії та підтверджується розподілом асферичностей окремих гілок, який демонструє наявність двох максимумів. Дослідження має відношення до реологічних властивостей складногалужених молекул та їх міцелізації для доставки ліків.

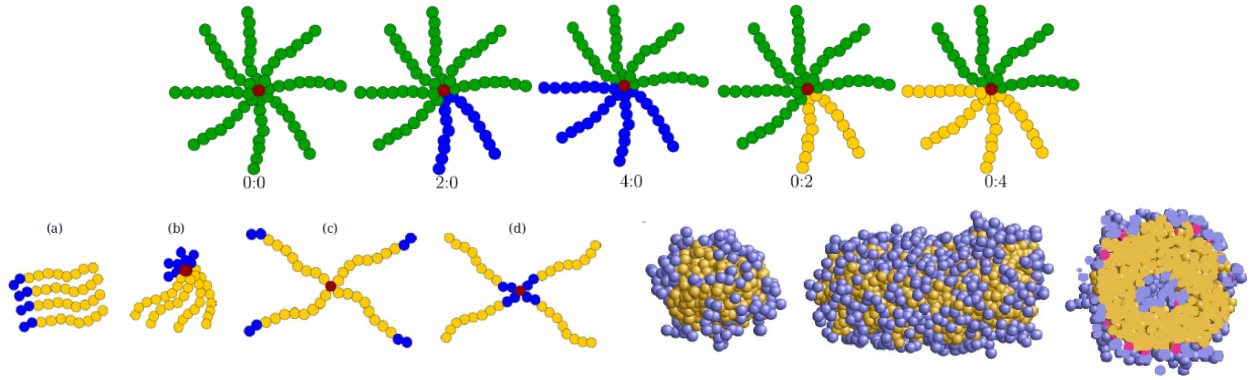


Рис.1. Верхній ряд: низка гомо- та гетерозіркових полімерів, які розглянуті в режимі безмежного розведення. Нижній ряд: чотири типи ланцюжків – незв'язні та три зіркові амфіфільні полімери [(a)–(d)] і три форми агрегатів, сформовані ними: сферична і несферична міцели та сферична везикула.

Агрегація подібних макромолекул виявила сильну залежність форм агрегатів, утворених у розчиннику, від деталей їх молекулярної архітектури. Це має перспективу застосування в системах доставки ліків. Як розмір, так і форма агрегату відіграє важливу роль при транспорті міцел по кров'яних судинах. Розглянуто чотири молекулярні архітектури, проілюстровані на Рис. 1 у нижньому ряду зліва. У всіх випадках отримано однакову послідовність форм: сферична міцела, асферична міцела та сферична везикула.

Встановлено, що «межі фаз» між ними залежать від деталей молекулярної архітектури. У випадках (a)–(c) трансформація сферичної в асферичну міцелу відбувається монотонно, а перехід від асферичної міцели до сферичної везикули – у формі різкого переходу. У випадку (b) асферична міцела – менш стійка, і перехід до везикули відбувається при нижчому агрегаційному числі. Випадок (d) характеризується поступовими переходами між усіма формами. Гістограми розподілу ймовірностей дескриптора форми – відносно вузькі для обох випадків сферичної міцели та везикули, вказуючи на широкий розкид форм агрегатів, як і на осциляції між ними, які знайдено в роботі.

1. O. Kalyuzhnyi, J.M. Ilnytskyi, Yu. Holovatch, C von Ferber, Universal shape characteristics for the mesoscopic star-shaped polymer via dissipative particle dynamics simulations, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 30, Iss. 21, Article No. 215101 (2018), DOI: 10.1088/1361-648X/aabc16,
2. O.Y. Kalyuzhnyi, J. Ilnytskyi, C. von Ferber, Shape characteristics of the aggregates formed by amphiphilic stars in water: dissipative particle dynamics study, Condensed Matter Physics, Vol. 20, Iss. 1, Article No. 13802 (2017), DOI: 10.5488/CMP.20.13802.

Адсорбція гомополінуклеотиду полірибоцитидилової кислоти на оксиді графену

М.В. Карачевцев, С.Г. Степаньян, В.О. Карачевцев, О.Ю. Іванов, В.О. Валеєв

(Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України)

Вперше експериментально показано, що адсорбція гомополінуклеотиду полірибоцитидилова кислота (Poly(rC)) на оксид графену (ГО) супроводжується спектральним зсувом електронних та коливних смуг, зміною його термостабільності. Моделювання методом молекулярної динаміки процесу адсорбції олігонуклеотидів $(rC)_{10}$ і $(rC)_{30}$ на графен демонструє розупорядкування їх структури внаслідок утворення π-π стєкінг структур азотних основ (цитозину) з поверхнею графену. Моделювання виявило повільнішу адсорбцію довшого олігонуклеотиду на графен, яка пояснюється більш сильним впорядкуванням початкової структури $(rC)_{30}$. Показано, що Ван-дер-Ваальсова взаємодія цитозинів з графеном забезпечує основний внесок у загальну енергію зв'язування олігонуклеотиду. Встановлено, що енергія зв'язку цитозину з графеном становить близько 12 ккал/моль у водному оточенні, тоді як для його нуклеотиду енергія зв'язування складає

~19,7 ккал/моль. За допомогою квантово-механічних розрахунків вперше отримано ІЧ спектри поглинання графену/оксиду графену. Встановлено, що взаємодія цитозину з графеном/оксидом графену призводить до зсуву ІЧ смуг поглинання ним світла в бік менших частот та значному зменшенню інтенсивності коливань, що пов'язано з високою поляризаційною здатністю графену/оксиду графену завдяки його π-електронній системі. Як показали квантово-хімічні розрахунки енергія зв'язування цитозину з графеном становить приблизно 19 ккал/моль у вакуумі. При адсорбції цитозину на лист ГО, їх комплекс додатково стабілізується Н-зв'язками, які утворюються між кисневмісними групами ГО та карбонільними або аміногрупами цитозину. Встановлено, що внесок Н-зв'язків у загальну енергію взаємодії цитозину з ГО, яка становить 25–28 ккал/моль, сягає 35–40%. Аналіз розрахованих ІЧ-спектрів модельних структур ГО, що відрізняються співвідношенням кисневмісних груп (карбоксильні : епоксидні : гідроксильні), показує, що ІЧ-спектр ГО сильно залежить від цього співвідношення та розміру листів ГО. Результати досліджень зв'язування відносно довгих біополімерів з графеном та ГО можуть бути корисним: (i) для економічно-ефективного вирішення проблеми біосумісності ГО, (ii) для з'ясування антибактеріальної дії ГО, оскільки один із можливих механізмів базується на безпосередньому контакті GO з бактеріальною ДНК, (iii) при використанні ГО як ефективної наноплатформи для доставки ДНК/РНК до клітин; (iv) для розв'язання завдання активації імунної системи людини та адаптивних імунних реакцій завдяки доставці в клітини двониткового полімеру Poly(rI):Poly(rC), до складу якого входить Poly(rC).

Механізм впливу тіольних сполук на люмінесценцію напівпровідникових одностінних вуглецевих нанотрубок

М.В. Курносов, В.О. Карачевцев
(Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України)

Виконано дослідження з отримання інформації стосовно механізму впливу тіольних сполук на люмінесценцію напівпровідникових одностінних вуглецевих нанотрубок. Люмінесценція одностінних вуглецевих нанотрубок зумовлена екситонами з високою мобільністю. Ця рухливість екситонів супроводжується значною чутливістю люмінесценції нанотрубок до дефектів на поверхні, що гасять люмінесценцію. До таких дефектів відносяться дірки у валентній зоні, що виникають при контакті поверхні нанотрубок з водою та розчиненим киснем. Раніше було показано, що тіольні сполуки як донори

електронів здатні нейтралізовувати вплив таких наявних дірок. Нами досліджено вплив тіольної сполуки – глутатіону. Глутатіон повністю синтезується в організмі людини, є основним антиоксидантом, а також бере участь у фолдингу білків та регуляції активності ферментів. Вперше показано, що додавання антиоксиданту глутатіону у водні суспензії одностінних вуглецевих нанотрубок з адсорбованою ДНК викликає зростання інтенсивності люмінесценції нанотрубок. Наявна в структурі глутатіону тіольна –SH група, що зумовлює його антиоксидантні та редокс властивості, забезпечує нейтралізацію дефектів на поверхні нанотрубок, що гасять їх люмінесценцію. Доведено, що ДНК у цьому комплексі забезпечує отримання індивідуальних нанотрубок, стабілізує їх водну суспензію, стримує створення дірок-дефектів та доступ до них молекул-відновників. Показано можливість створення люмінесцентного сенсора для детекції цього антиоксиданту в тому концентраційному діапазоні, що спостерігається в організмі людини. Встановлено, що існує можливість кількісного аналізу концентрації глутатіону за рахунок співвідношення різних концентраційних залежностей інтенсивності свічення в різних смугах люмінесценції нанотрубок, які відповідають нанотрубкам різних хіральностей. Перевага такого ратіометричного підходу полягає в тому, що подібне співвідношення інтенсивностей у спектрі не залежить від умов збудження, а лише від концентрації сполуки, що аналізується.

Фазова поведінка іонних розчинів: модель з явним врахуванням розчинника

О.В. Пацаган, Т.М. Пацаган
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

Фазова рівновага рідина-рідина у розчинах електролітів та іонних рідинах при кімнатній температурі представляє одну з найважливіших проблем фізичної хімії та хімічної інженерії. Зокрема, розуміння фазової поведінки в таких система має важливе значення в багатьох технологічних процесах (екстракція, очищення та ін.).

Фазова поведінка іонних розчинів активно вивчається з використанням теоретичних підходів і методів комп'ютерного моделювання впродовж кількох десятиліть (див. огляд [1] і цитовану в ньому літературу). Більшість теоретичних моделей розчинів електролітів, які використовуються в цих дослідженнях, це, так звані, примітивні моделі (ПМ), які не враховують явно присутність розчинника. В [2] ми розглянули випадок суміші іонного плину і нейтрального розчинника в рамках обмеженої ПМ (ОПМ) іонної рідини і

твердих сфер (ТС). Ця задача вирішувалася із використанням трьох наближень: наближення хаотичних фаз з регуляризацією кулонівського потенціалу згідно схеми Вікса-Чандлера-Андерсона, середньо-сферичного наближення (ССН) та асоціативного середньо-сферичного наближення (АССН). Показано, що всі наближення якісно відтворюють один одного. Зокрема, на основі фазових діаграм, отриманих в координатах температура-густина та температура-концентрація при фіксованих тисках, було проведено аналіз фазової поведінки типу рідина-рідина в таких системах, з якого слідує наступне: (i) збільшення тиску приводить до зсуву області співіснування в сторону вищих густин та її звуження, при цьому критична температура залишається практично незмінною; (ii) концентрація нейтрального розчинника із збільшенням тиску зростає в обидвох фазах. Кількісний опис фазового переходу найкраще забезпечується в наближенні АССН з константою асоціації Олоссена-Стелла. На Рис. 1 представлено фазову діаграму суміші ОПМ-ТС в координатах тиск-загальна густина і тиск-концентрація, отриману в наближенні АССН [2] і з використанням методу Монте Карло [3].

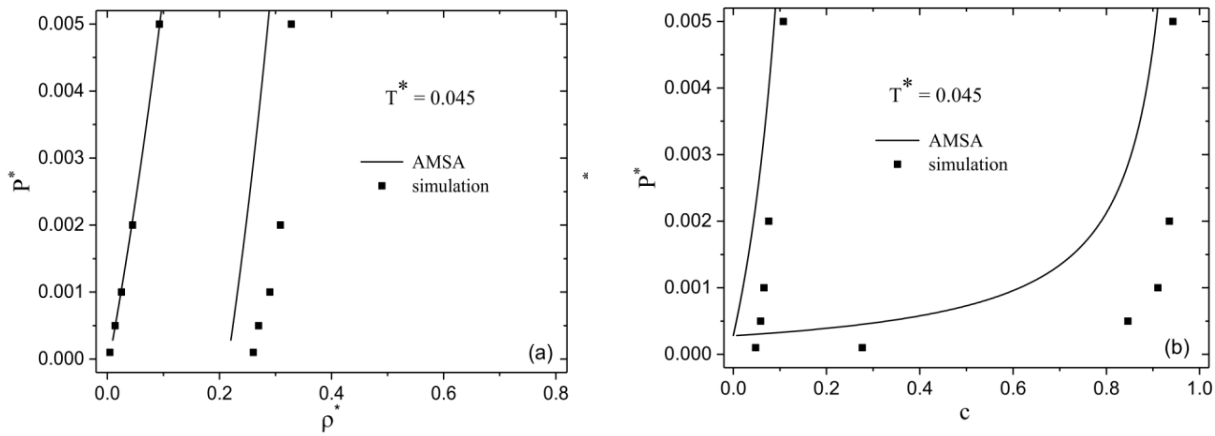


Рис. 1. Криві співіснування суміші ОПМ-ТС, представлені в координатах $P^* - \rho^*$ (a) і $P^* - c$ (b) при постійній температурі $T^* = 0.045$. Результати АССН позначені лініями і результати комп'ютерного моделювання [3] позначені точками. $P^* = P\varepsilon\sigma^4 / e^2$, $T^* = k_B T\varepsilon\sigma / e^2$, $\rho^* = \rho\sigma^3$, $\rho = \rho_s + \rho_i$, $c = \rho_s / \rho$, ρ_s і ρ_i – густина частинок розчинника та іонів, відповідно.

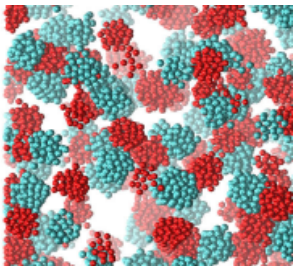
1. O. Patsahan, I. Mryglod, In “Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition”, ed. Holovatch Yu. (Singapore: World Scientific) Vol. 3 p. 47–92 (2012).
2. O.V. Patsahan, T.M. Patsahan, J. Mol. Phys., **275**, 443 (2019).
3. T. Kristóf , D. Boda, J. Liszi, D. Henderson, E. Carlson, Mol. Phys. **101,** 1611 (2003).

Вплив флуктуацій на кореляційні функції в негомогенних сумішах

О.В. Пацаган
(Інститут фізики конденсованих систем НАН України)

В [1] досліджено кореляційні функції бінарних негомогенних сумішей, використовуючи мезоскопічну теорію, яка дозволяє врахувати внесок від флуктуацій на мезоскопічних масштабах [2]. Для бінарної суміші в невпорядкованій негомогенній фазі виведено наближені рівняння для парціальних кореляційних функцій. Ми розглянули дві моделі бінарної суміші. У першій моделі ми припускаємо взаємодії, які спричинюють негомогенність на масштабах довжини $\sim 10\sigma$, де σ – молекулярний розмір. У цій моделі частинки одного і того ж сорту притягуються на близьких і відштовхуються на далеких віддалях (т.зв. потенціал SALR), а пара частинок різних сортів, навпаки, відштовхуються на малих і притягуються на великих віддалях. Такого роду ефективні взаємодії можуть мати місце між протилежно зарядженими гідрофільними та гідрофобними колоїдними частинками, зануреними в майже критичну суміші з іонами [4]. У другій моделі ми припускаємо короткодіючі взаємодії у формі квадратної ями лише між частинками різних сортів. Цей потенціал може призвести до фазового переходу газ-рідина, а також до впорядкованої фази, що нагадує іонний кристал зі структурою на масштабах довжини σ [2].

Обчислено кореляційні функції у невпорядкованій фазі як вище, так і нижче лінії нестійкості, що була отримана в наближенні середнього поля (СП). Результати показують, що незважаючи на різні потенціали взаємодії та різні масштаби локального впорядкування, кореляційні функції двох моделей мають подібні властивості. Для розглянутих моделей виконано моделювання методом Монте Карло (МК). Наша теорія напівкількісно узгоджується із моделюванням в тій частині фазової діаграми, де невпорядкована фаза втрачає стійкість у наближенні СП, але насправді залишається стійкою.



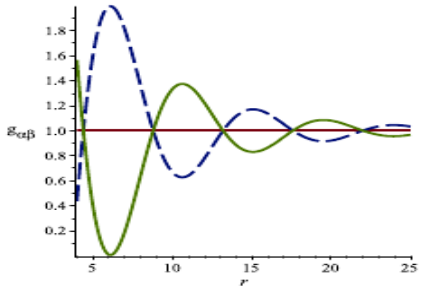


Рис. 1. Типова конфігурація, отримана методом МК і типові парні функції розподілу, отримані в теорії для частинок однакових (суцільна лінія) і різних (пунктирна лінія) сортів в першій моделі.

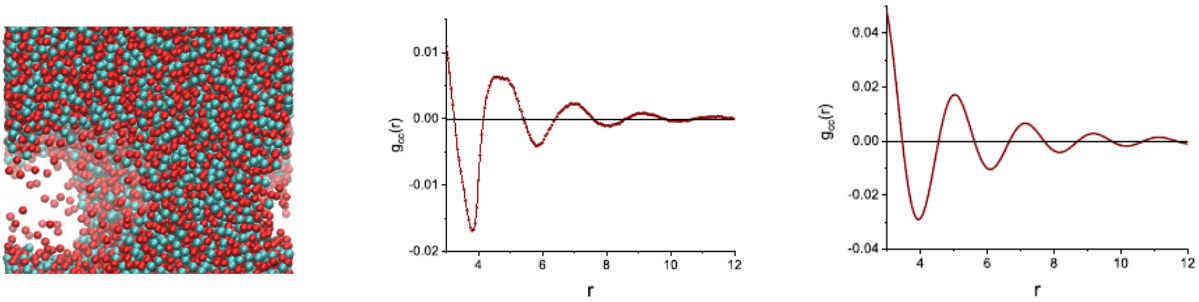


Рис. 2. Типова конфігурація (ліворуч) і типова функція розподілу концентрація-концентрація, отримана в симуляціях (центр) і в теорії (праворуч) для другої моделі.

1. A. Ciach, O. Patsahan, A. Meyra, Condens. Matter Phys., **23**, 23601 (2020).
2. A. Ciach, Mol. Phys., **109**, 1101 (2011).
3. A. Ciach, Advances in Biomembranes and Lipid Self-Assembly, **23**, p. 61–100 (2016).

Бозе-ейнштейнівська конденсація гетероядерних зв'язаних станів, що утворюються в газі ферміонів двох різних атомних сортів: мікроскопічний підхід

С.В. Пелетминський, Ю.В. Слюсаренко, О.С. Пелетминський
(*Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України*)

Досліджено явище бозе-ейнштейнівської конденсації гетероядерних фермі-фермі молекул, які утворюються в двокомпонентному слабконеідеальному фермі-газі. Знайдено основні термодинамічні характеристики системи, такі як спектри одночастинкових збуджень, енергію основного стану, густину молекулярного конденсату, густину вільних (незв'язаних) фермі-атомів. Визначено як аналітично, так і чисельно границі застосування розвинутого підходу. З метою наближення результатів до реальних експериментальних умов при чисельному аналізі розглянуто суміш атомів ^{6}Li та ^{173}Yb, одночасна квантова виродженість яких спостерігалась експериментально.

A.S. Peletminskii, S.V. Peletminskii, Yu.V. Slyusarenko, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 2017, v. 50, 145301 (1–13).

Метод скороченого опису в кінетичній теорії броунівського руху з активними флуктуаціями

Ю.В. Слюсаренко, О.Ю. Слюсаренко
(*Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України*)

Розроблено мікроскопічний підхід до кінетичної теорії систем багатьох частинок із дисипативною та потенційною взаємодіями за наявності активних флуктуацій. Підхід заснований на узагальненні на випадок систем багатьох активних частинок методу скороченого опису Боголюбова–Пелетминського. Показано, що розроблений мікроскопічний підхід дозволяє побудувати кінетичну теорію дво- і тривимірних систем активних частинок за наявності нелінійного тертя (дисипативна взаємодія) та зовнішнього випадкового поля з активними флуктуаціями. Здобуто кінетичні рівняння для таких систем у випадку слабкої взаємодії між частинками (як потенційної, так і дисипативної) та низької інтенсивності активних флуктуацій. Розглянуто окремі випадки розв'язків виведених кінетичних рівнянь й продемонстровано їх відповідність результатам інших авторів, відомим із літератури й здобутих у рамках феноменологічних підходів. Крім того, аналіз часткових розв'язків показав, що навіть у випадку сили тертя, лінійно залежної від швидкості частинки, в системі можуть спостерігатися прояви самохідних властивостей, зумовлені локальним характером зовнішнього активного шуму.

Oleksii Sliusarenko and Yurii Slyusarenko, J. Phys. A: Math. Theor., **52,** (2019) 445001.

Точний розв'язок статистично-механічної задачі для квазі-одновимірної системи твердих дисків

В.М. Пергамещик
(Інститут фізики НАН України)

Фазові переходи відбуваються в термодинамічній границі, відтак аналітичні розв'язки мають фундаментальне значення, бо лише вони дозволяють розглянути нескінченні системи. Модель твердих сфер у фізиці рідин має статус базисної, але єдиний точний розв'язок було отримано 1936 року (Тонкс) лише для одновимірної моделі. В роботі [1] отримано точний розв'язок двовимірної задачі твердих дисків (ТД) у вузькій порі, або квазі-одновимірної (q1D) задачі ТД. В термодинамічній границі $N/L \to \infty$ аналітично отримано точну канонічну (N,L,D,T) статистичну суму цієї моделі для даної довжини L та ширини D пори. Тиск вздовж і поперек пори, розподіл контактних відстаней дисків вздовж і розподіл центрів дисків поперек пори отримано аналітично. Показано, що перехід від квазі-кристалічного до рідинного стану є досить різким за шкалою густини, але немає істинної сингулярності. Запропоновано кількісний опис переходу в термінах розподілу вікно-подібних дефектів у кристалічному зиґзаґу, крізь які диски обмінюються своїми поперечними координатами. Такі дефекти зникають лише в щільному стані, що вказує на аналогію цього переходу в q1D системі з переходом Костерліца–Таулеса в 2D системах.

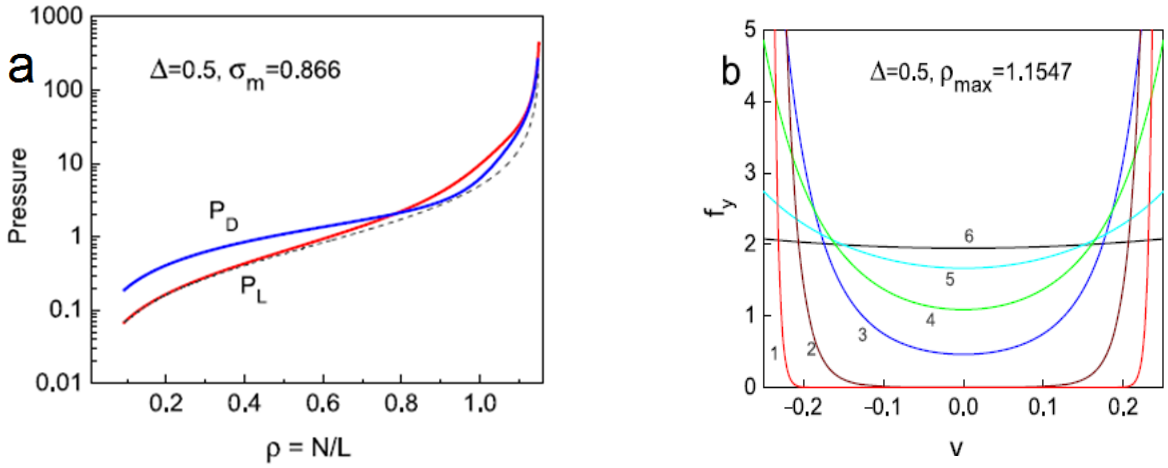


Рис. 1. a). Повздовжній P_L і поперечний P_D тиски в системі з $D = 1.5\sigma$ як функції лінійної густини $N\sigma/L$ (σ =1). b). Розподіл дисків як функція поперечної координати y/σ для таких густин: 1 – 1.14, 2 – 1.111, 3 – 1.056, 4 – 1.01, 5 – 0.79, 6 – 0.5.

1. V.M. Pergamenshchik, Analytical canonical partition function of a quasi-one-dimensional system of hard disks, J. Chem. Phys. **153**, 144111 (2020).

Модифікована суперобмінна модель формування нерезонансного тунельного струму через молекулярний провід

Е.Г. Петров
(Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України)

Розвинуто модифіковану суперобмінну модель формування нерезонансного тунельного струму через молекулярний провід, що складається з регулярного ланцюжка та термінальних одиниць. Знайдено граничні вирази для струму, які співпадають із виразами, отриманими з бар'єрної та стандартної суперобмінних моделей. Визначено межі застосовності цих моделей, а також знайдено умови, при яких збільшення кількості блоків ланцюжка може супроводжуватися чисто експоненційним спаданням струму. За допомогою моделі інтерпретовано експериментальні дані по залежності вольт-амперних характеристик алканотіолових ланцюжків від числа С-С зв'язків у проводі (приклад на Рис. 1), а також сформульовано умови, за яких найпростіша модель прямокутного бар'єру з ефективною електронною масою, що тунелює, може бути використана для обробки експериментальних даних.

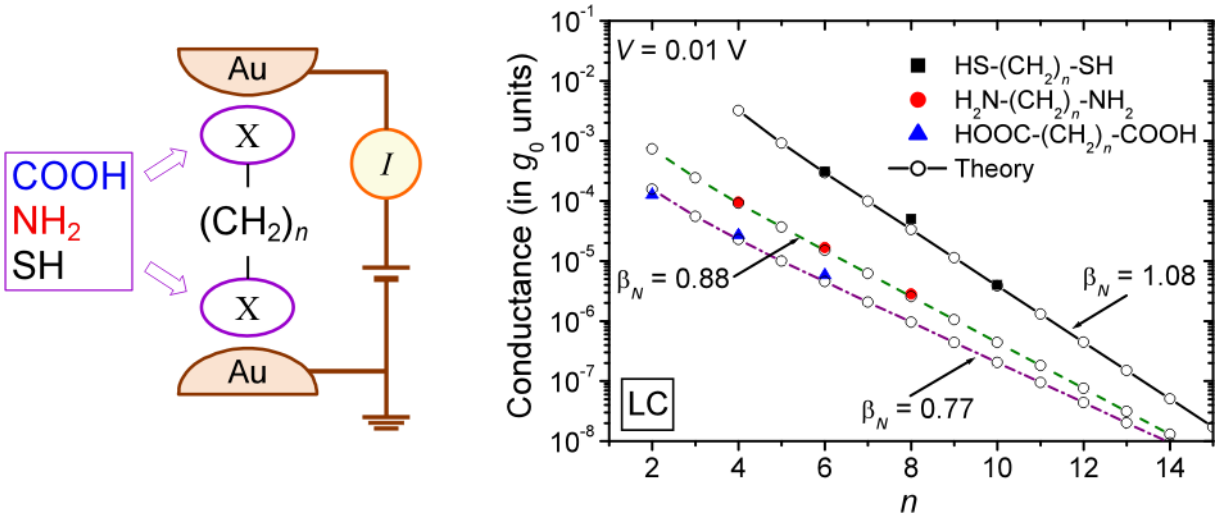


Рис. 1. Провідность алканових ланцюжків.

1. E.G. Petrov, Phys. Stat. Sol. B **256**, 1900092 (2019).
2. E.G. Petrov, Ye.V. Shevchenko, V. Snitsarev, V.V. Gorbach, A.V. Ragulya, S. Lyubchik, AIP Advances **9**, 115120 (2019).

Кінетика формування електролюмінесценції в наносистемах метал-молекула-метал

Е.Г. Петров
(Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України)

Досліджено кінетику формування електролюмінесценції в наносистемах метал-молекула-метал із симетричними та асиметричними зв'язками молекули з електродами та показано, що оптично активний стан молекули виникає за рахунок передачі енергії електрона, що переноситься, молекулі як стрибковим шляхом, так і в результаті непружного тунелювання електрона. Для молекул-хромофорів знайдено умови посилення електролюмінесценції за рахунок як заміни інтерфейсу, так і зміни енергетичного спектра молекули. Знайдено критичні різниці потенціалів та умови, при яких здійснюється біполярна або уніполярна електролюмінесценція. На основі проведених оцінок потужності випромінювання зроблено висновок про те, що електролюмінесценція ефективніша у фотодіодах, які проявляють уніполярність, пов'язану з асиметричним зв'язком флуорофору з електродами. На Рис. 1 показано, яким чином поява уніполярності пов'язана з асиметрією розташування електронних густин флуорофору по відношенню до поверхонь електродів у фотодіоді.

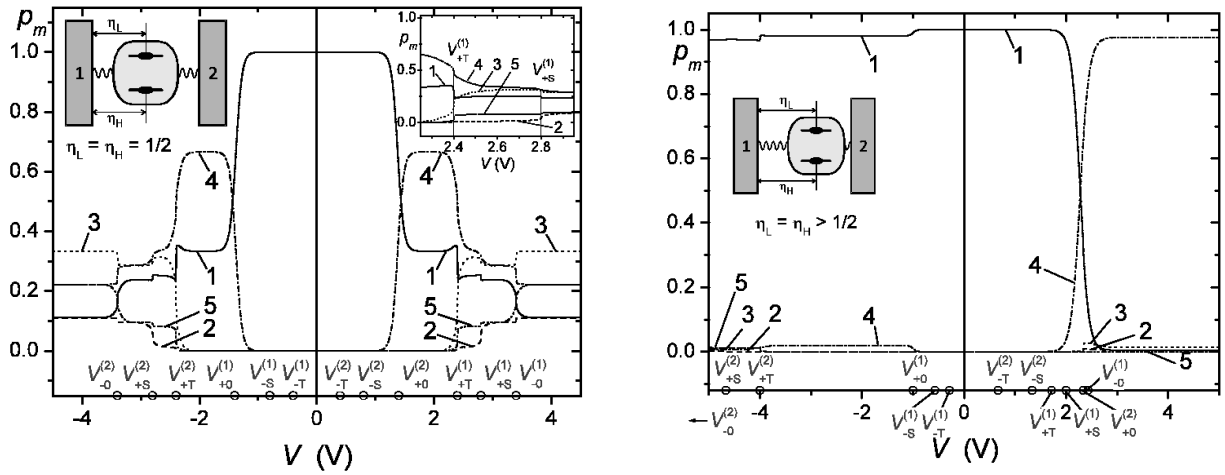


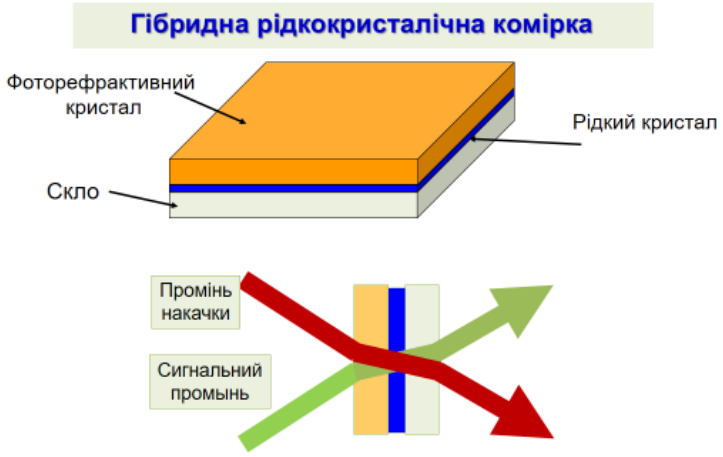
Рис. 2. Біполярна та уніполярна електролюмінесценція в молекулярному фотодіоді. Стрибкоподібна зміна потужності пов'язана з перемиканням режиму трансмісії електронів через флуорофор.

1. E. Petrov, V. Leonov, Y. Shevchenko, JETP Letters **105**, No. 2, 89 (2017).
2. E. Petrov, V. Leonov, Y. Shevchenko, Modern Physics Letters B **34,** No. 18, 2040063 (2020).
3. E.G. Petrov, V.V. Gorbach, A.V. Ragulya, A. Lyubchik, S. Lyubchik, J. Chem. Phys. **153**, 084105 (2020).

Взаємодія світлових променів на дифракційних ґратках у гібридних рідкокристалічних комірках

В.Ю. Решетняк
(Київський національний університет імені Тараса Шевченка)

Теоретично досліджено взаємодію світлових променів на дифракційних ґратках у гібридних рідкокристалічних комірках. Рідкокристалічний шар розміщений між світлопроникними підкладками, одна з яких є фоторефрактивною. Падаючі на фоторефрактивну підкладку світлові промені перетинаються та індукують у фоторефрактивній підкладці просторово-періодичне електричне поле (поле просторового заряду). Поле просторового заряду проникає в рідкий кристал і взаємодіє з директором рідкого кристалу. Виникаючий просторово-періодичний розподіл директора (ґратка директора) зумовлює виникнення дифракційної ґратки показника заломлення рідкого кристалу. Світлові промені, що поширюються в рідкокристалічній комірці, взаємодіють на ґратці директора. Встановлено фізичні механізми, відповідальні за утворення ґратки директора в рідких кристалах різного типу, та знайдено умови, при яких взаємодія променів приводить до підсилення слабкого сигнального променя. Показано, що коефіцієнт підсилення сигнального променя в розглянутих гібридних рідкокристалічних комірках може перевищувати більш, ніж на два порядки, коефіцієнт підсилення в звичайних твердих фоторефрактивних кристалах [1–6].



1. V.Yu. Reshetnyak, I.P. Pinkevych, S.I. Subota, and D.R. Evans. Two beam energy exchange in hybrid liquid crystal cells with photorefractive field controlled boundary conditions, AIP Advances 2016, v. 6, 095207 (1–9).

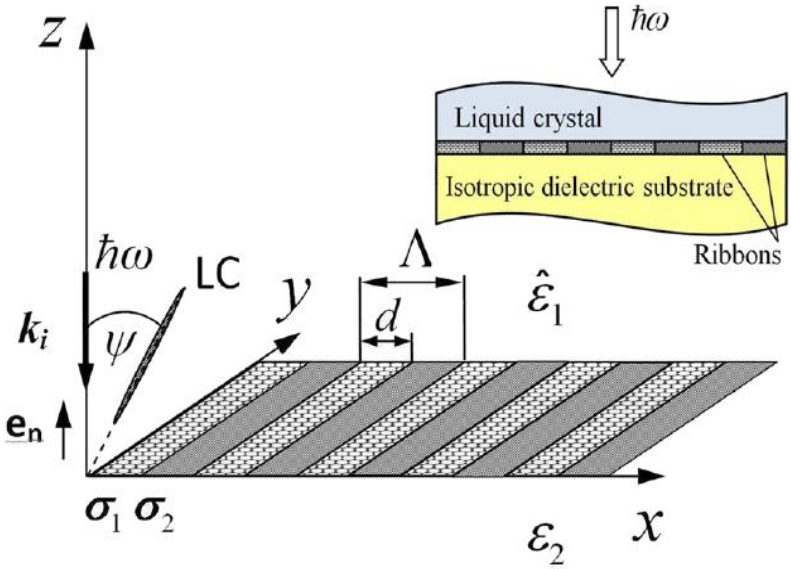
2. I.P. Pinkevych, V.Yu. Reshetnyak, and D.R. Evans. Two-Wave Energy Exchange in Photorefractive Hybrid Cell with Bent-Core Liquid Crystal, Mol. Cryst. Liq. Cryst., 2017, v. 646, N 1, pp. 250–262.
3. V.Yu. Reshetnyak, I.P. Pinkevych, and D.R. Evans. Flexoelectro-optic effect and two-beam energy exchange in a hybrid photorefractive cholesteric cell with a short-pitch horizontal helix, Phys. Rev. E, v. 97, N.6, 062701 (2018).
4. Victor Yu. Reshetnyak, Igor P. Pinkevych, and Dean R. Evans. Impact of photo-transformed molecules on two-beam energy exchange in hybrid photorefractive cholesteric cells, Journ. Mol. Liq., 267, 45–55 (2018).
5. V.Yu. Reshetnyak, I.P. Pinkevych, M.E. McConney, and D.R. Evans. Director grating and two-beam energy exchange in a hybrid photorefractive cholesteric cell with a helicoidal polymer network, J. Appl. Phys.127, 125502 (2020).
6. Victor Yu. Reshetnyak, Igor P. Pinkevych, Michael E. McConney, Jonathan E. Slagle and Dean R. Evans. Impact of the Liquid Crystal Director Twisting on Two-Beam Energy Exchange in a Hybrid Photorefractive Inorganic-Liquid Crystal Cell, Crystals 10, 1104 (2020).

Спектри поглинання неоднорідних шаруватих рідкокристалічних систем

В.Ю. Решетняк
(Київський національний університет імені Тараса Шевченка)

Теоретично вивчено спектри поглинання мікро-стрічкових MoS_2 ґраток та графен-MoS_2 ґраток, розміщених між нематичним рідким кристалом та ізотропним діелектричним середовищем. Показано, що в дальній інфрачервоній області (6–140 мкм) спостерігаються максимуми в спектрах поглинання, пов’язані зі збудженням плазмонів у мікро-стрічках. Для фіксованих параметрів провідності мікро-стрічки спектральне положення максимумів поглинання залежить від періоду ґратки та ширини мікро-стрічки. Досліджено вплив 2D- концентрації електронів (n2D) стрічок MoS_2 на спектри поглинання і показано, що він відрізняється для випадків MoS_2 та графен-MoS_2 ґраток. У випадку ґратки MoS_2 спостережений зсув піків поглинання в бік коротших довжин хвиль та збільшення їх величини зі збільшенням n2D. У випадку графен-MoS_2 ґратки збільшення n2D приводить спочатку до появи нових плазмонних режимів та зсуву їх піків поглинання в напрямку коротких довжин хвиль із поступовим зменшенням їхньої пікової величини. Це відбувається тому, що провідність стрічок MoS_2 та графена вирівнюється зі збільшенням n2D, що приводить до зменшення величини показника заломлення ґратки. Коли уявні частини провідності стрічки MoS_2 та графенової стрічки стають рівними, ґратка показника заломлення зникає, а

всі піки плазмонних збуджень зникають. При подальшому збільшенні n2D піки поглинання знову з'являються в коротшій частині спектра. Показано, що спектральний зсув залежностей максимумів поглинання від ширини стрічки може бути спостережений в залежності від n2D як на коротко- , так і довгохвильовій стороні спектру. Також показано, що величина піків поглинання в MoS_2 та графен-MoS_2 ґратках залежить від стану орієнтації рідкого кристалу. Вплив зміни стану орієнтації рідкого кристалу на плазмонний резонанс зростає зі збільшенням відношення ширини стрічки MoS_2 до періоду ґратки для MoS_2-ґратки, а також ширини графенової стрічки до періоду ґратки для графен-MoS_2 ґратки. Отримані результати можуть бути використані для проектування нових типів фотонних структур, що поєднують динамічні властивості молекул рідкого кристалу з базовими плазмонними властивостями MoS_2 та графен-MoS_2 ґраток.



Surface plasmon absorption in MoS_2 and graphene-MoS_2 micro-gratings and the impact of a liquid crystal substrate, V. Yu. Reshetnyak, V. I. Zadorozhnii, I. P. Pinkevych, T. J. Bunning, D. R. Evans, AIP Advances Vol. 8, 045024 (2018).

Рідини в обмеженій геометрії

О.В. Чалий
(Національний медичний університет імені О.О.Богомольця, кафедра медичної і біологічної фізики та інформатики)

Теоретично досліджено такі проблеми [1,2]: лінія Відома та її аналоги в надкритичній і метастабільній областях; вплив розмірного кросовера (РК) на критичні показники, ефективні просторову $d_{еф}$ та фрактальні $d_{фр}$ розмірності; аномальна поведінка коефіцієнта дифузії D та коефіцієнта зсувної в'язкості η в об'ємних рідинах та обмеженій переохолодженій воді (ОПВ) поблизу критичних точок; особливості спектрів молекулярного розсіяння світла (МРС) і квазіпружного розсіяння нейтронів (КПРН) та їхнє застосування в медицині.

Вивчено вплив РК, пов'язаний із пошаровим впорядкуванням у плоско-паралельних і цилиндричних нанорозмірних порах, заповнених водою. Обчислено ефективні критичні індекси рідинних систем, що належать до класу універсальності моделі Ізінґа. Досліджено залежність ефективних просторової та фрактальної розмірностей від геометричного фактора, який визначається кількістю молекулярних шарів вздовж напрямків просторової обмеженості рідинних об'ємів. Аномалії кінетичних коефіцієнтів в'язкості та дифузії досліджувалися в об'ємній воді та ОПВ у широких інтервалах розміру, темпратури, концентрації, тиску, що відповідають динамічним флуктуаційній, кросоверній та регулярній областям. Досліджено проблему порушення співвідношення Стокса–Ейнштейна в ОПВ. Встановлено специфічні властивості спектрів МРС та КПРН в обмежених рідинах, а саме: при збільшенні лінійного розміру L системи ширини центральної лінії Релея і піку КПРН швидко зменшуються пропорційно L^{-2}; ширина компонентів Мандельштама-Бриллюена сильно зростає пропорційно L^{3}; зсув частоти компонентів Мандельштама-Бриллюена повільно зменшується пропорційно $L^{-0,087}$; величина співвідношення Ландау-Плачека суттєво зменшується пропорційно $L^{-1,79}$. Ці результати створюють основу для впровадження діагностичного методу виявлення пухлинних утворень у практичній медицині.

Теоретично досліджено [3] поверхневі явища в об'ємних і обмежених рідинах та їх зв'язок із наявними експериментальними даними. Отримано формули для залежності КПН і КК від температури, густини, тиску та лінійних розмірів рідинної системи, включаючи критичну область. Співпадіння теоретичних та експериментальних даних температурної залежності КНТ і КК виявляється цілком задовільним. Проаналізовано РК для КПН та КК при пошаровому впорядкуванні від «поверхневих» $2d$ до «об'ємних» $3d$ рідин. Досліджено КПН рідин із відносно невеликим числом Гінзбурга $Gi < 1$, включаючи об'ємну воду, з врахуванням РК від $3d$ до $4d$ рідинних систем, де

стає справедливою (з логарифмічною точністю) теорія середнього поля Ландау. Проведено теоретичний аналіз емпіричної формули для КПН води, що була рекомендована Міжнародною асоціацією властивостей води і водяної пари (IAPWS), з урахуванням поправки Толмана та результатів флуктуаційної теорії фазових переходів. Запропоновано медичні застосування отриманих результатів для КПН із використанням гіпотези ізоморфізму процесів канцерогенезу та нуклеації.

1. A.V. Chalyi, Dynamic anomalies in confined sypercooled water and bulk fluids, Modern Problems of Molecular Liquids, Springer International Publishers, Switzerland, 2018, pp. 253–289.
2. Leonid Bulavin, Alexander Chalyi (Eds.) Modern Problems of Molecular Liquids, Springer International Publishers, Switzerland, 2018.
3. A.V. Chalyi, Surface tension in bulk and bounded liquids, J. Mol. Liquids 288 (2019) 110873, https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.04.1504.

Синергетичний діалог «фізика – медицина»

О.В. Чалий
(Національний медичний університет імені О.О.Богомольця, кафедра медичної і біологічної фізики та інформатики)

Основна мета досліджень, які проведяться на кафедрі медичної і біологічної фізики та інформатики в НМУ імені О.О. Богомольця, полягає у застосуванні синергетичних методів на границі фізики та медицини. Розглянено синергетичну аналогію між системами різної природи, в яких виникають гексагональні структури [1], а саме: (а) фізичною системою гексагональних комірок Бенара та (б) нейрофізіологічною системою так званих «клітин решітки» (grid cells) в головному мозку. Дослідження нейрофізіологічної системи, яка відповідіє за орієнтацію людини або тварини в просторі, були в 2014 р. удостоєні Нобелівської премії з фізіології та медицини, яку отримали Д. О'Кіф за відкриття в 1971 р. так званих «клітин (нейронів) місця» (place cells), а також М.-Б. Мозер та Е.І. Мозер за відкриття у 2005 р. «клітин решітки» (grid cells).

Для пояснення основної причини утворення гексагонів у мозку людини або тварини використано класифікацію, яку в [1] запропоновано назвати «Класифікація Фейнмана трьох етапів пізнання природних явищ». Особливо важливим є 3-й етап вивчення природних явищ, пов'язаний із розумінням перших принципів, що лежать в основі цих явищ, які були відкриті на 1-му експериментальному етапі та для яких були створені відповідні теорії на 2-му

етапі. Запропоновано флукуаційну модель хімічно взаємодіючої системи нейронів головного мозку, для побудови якої були використані флуктуаційна теорія фазових переходів, зокрема гамільтоніан Гінзбурга-Ландау, гіпотеза конформної інваріантності Полякова та результати Хакена щодо комірок Бенара. Перший принцип утворення гексагонів в ґрід-комірках формулюється як прояв нелінійної взаємодії флуктуацій параметрів порядку хімічно (біо-хімічно) реагуючої системи, якими є ступені повноти (координати) хімічних реакцій. Вершини віртуальної гексагональної решітки представляють собою геометричне місце точок, в котрих виникає потенціал дії (firing of action potential). Відповідно до гіпотези універсальності та синергетичної подібності утворення гексагонів у комірках Бенара та ґрід-комірках, обидві системи належать до одного класу універсальності тривимірної моделі Ізінґа, що має скалярний параметр порядку. Цей клас універсальності включає класичні рідини, рідкі кристали в наближенні Маєра-Заупе, хімічно реагуючі ґрід-комірки головного мозку. Ідея подібності першого принципу появи гексагонів в комірках Бенара та в ґрід-комірках робить її, на думку автора [1], більш привабливою, ніж ідея подружжя Мозерів щодо аналогії між утворенням гексагонів у ґрід-комірках та вихровою решіткою Абрикосова в надпровідниках 2-го роду в сильних магнітних полях.

Досліджено синергетичний ізоморфізм (схожість) між процесами канцерогенезу і нуклеації [2]. Теоретичний підхід, заснований на використанні такої гіпотези, дозволяє сформулювати наступні важливі висновки: а) критичний розмір зародка пухлини прямо пропорційний коефіцієнту поверхневого натягу; б) величина енергетичного бар'єру утворення дієздатного зародка прямо пропорційна кубу коефіцієнта поверхневого натягу; в) динамічний процес канцерогенезу характеризується біфуркаційною поведінкою в часі. За першим сценарієм, якщо розмір зародка нової фази (пухлини) менший критичного, то такому зародку енергетично вигідніше зменшуватися. За другим сценарієм, якщо розмір зародка нової фази більший критичного, то йому енергетично вигідніше надалі зростати. Таким чином, головний фундаментальний висновок полягає в тому, що необхідною умовою, яка повинна запобігти утворенню і подальшому неконтрольованому зростанню патологічних пухлин, є використання ефективних, нетоксичних, поверхнево-неактивних речовин, які збільшують коефіцієнт поверхневого натягу.

1. A.V. Chalyi, Synergetic dialogue "physics-medicine": Hexagons in living and inanimate nature, J. Mol. Liquids, Vol. 320, Part A, 2020, 114293, https: //doi:10.1016/j.molliq.2020.114293

2. 1. A.V. Chalyi, Synergetic similarity of carcinigenesis and nucleation processes: medical consequences, 0A Journal of Oncology 2020, 1:003 (17 pp.), doi: 10.33118/oaj.0ncol.2020.01.003

Анотації вибраних результатів наукових досліджень

1. Статистична фізика

Рівняння Ван-дер-Ваальса узагальнюється для системи твердих сфер шляхом врахування залежності параметра виключеного об'єму від густини. Отримано аналітичні наближення для параметра виключення і проаналізовано наскільки вони покращують точність рівняння. Результати представлені в порівнянні з даними комп'ютерного моделювання методом Монте-Карло. Показано, що виключений об'єм зменшується приблизно на половину у діапазоні густини, де система все ще перебуває в рідкому стані *(А. Баумкетнер, Р. Мельник, А. Трохимчук, ІФКС НАН України).*

В рамках формалізму узагальнених колективних мод проаналізовано можливість спостереження збуджень оптичного типу в розплавах солей. Показано, що залежні від частоти парціальні провідності задовольняють точним співвідношенням, які слідують із законів збереження повного імпульсу та умови електронейтральності, а також – як і повна провідність системи – мають максимум на частотній залежності, що відповідає довгохвильовій границі частоти поперечних збуджень оптичного типу. Таким чином, виникають перспективи експериментальної фіксації оптичних мод у розплавах солей *(І. Мриглод, ІФКС НАН України).*

Досліджено роль негідродинамічних процесів у кросовері від в'язкої до еластичної поведінки в густих плинах. Зокрема, використовуючи як аналітичний підхід, так і метод комп'ютерного моделювання, з'ясовано вплив релаксації зсувних напружень на поперечну динаміку. На прикладі Леннард-Джонсівських рідин проаналізовано частотну залежність зсувних модулів і вивчено її зв'язок із негідродинамічною зсувною релаксаційною модою. Проведено аналіз часів релаксації не-гідродинамічних мод для поперечної та повздовжньої динамік, який показав, що поява негідродинамічних поперечних збуджень поза пропагаторною щілиною не є прямо пов'язана з проявом позитивної дисперсії у звукових збудженнях *(І. Мриглод, Т. Брик, ІФКС НАН України).*

Методом непружного розсіювання Х-променів із високою роздільною здатністю для розплаву NaI поблизу точки плавлення (680 $^{\circ}$C) виявлено вклади від повздовжніх колективних збуджень, що спостерігалися на хвостах акустичних режимів при малих імпульсах передачі ($Q \sim 5$ nm^{-1}). Експериментально спостережувані спектри виявилися у доброму узгодженні як за частотою, так за коефіцієнтами згасання, з розрахунками, що були

виконані методом ab initio молекулярної динаміки. Це дозволило чітко ідентифікувати відповідні вклади як колективні збудження оптичного типу, що описують скорельований антифазний рух іонів протилежного знаку і були передбачені українською групою теоретично *(Т. Брик, І. Мриглод, ІФКС НАН України).*

В рамках єдиного підходу досліджено автокореляційні функції швидкостей для плинів на різних часових масштабах. Підхід базується на схемі ефективного підсумовування безмежних ланцюгових дробів у припущенні про збіжність часів релаксації вищих функцій пам'яті до часу, типового для кінетичних процесів. Аналітично отримані результати порівнюються з даними комп'ютерного моделювання для рідкого Ne при різних густинах. Показано, що в усіх термодинамічних точках, які розглядалися, отримані теоретичні результати краще узгоджуються з експериментом у порівнянні з тими, що слідують з марківського наближення для вищих функцій пам'яті. Розраховано перехідний час, що необхідний для виходу системи на гідродинамічний режим. Запропонований підхід, що має ширшу область використань, порівнюється з іншими відомими методами, зокрема підходом узагальнених колективних мод і теорією взаємодіючих мод *(І. Мриглод, В. Ігнатюк, Т. Брик, ІФКС НАН України).*

Проведено дослідження проблем встановлення зв'язку між поверхневим натягом леннард-джонсівської рідини та визначення товщини міжфазної області на основі відомих властивостей моделі Ізінґа (2-, 3-вимірах). Загальним методом досліджень є концепція глобального ізоморфізму між реальними рідинними системами та ґратковими, ізінґоподібними моделями. Вивчення просторово-неоднорідних станів стандартними методами фізики рідин стикається зі значно більшими труднощами, ніж для просторово-однорідних властивостей. Результати, отримані для об'ємних властивостей, дозволили розширити рамки підходу глобального ізоморфізму і застосувати його для опису поверхневого натягу та ширини міжфазного шару на границі рідина-пара [V. Kulinskii and A. Maslechko, Surface Tension of the Liquid-Vapor Interface of the Lennard-Jones Fluids from the Ising Model. The Journal of Physical Chemistry C, 2016. 120 (16): p. 8790–8803; A.Maslechko, K. Glavatskiy and V. Kulinskii. Surface tension of molecular liquids: Lattice gas approach. Journal of Molecular Liquids, 2017. 235: p. 119–125] *(В.Л. Кулінський, ОНУ імені І.І. Мечникова; А. Маслечко, Норвезький інститут науки та технології, Трондхайм; К. Главацький, Квінслендський університет, Австралія).*

Досліджено вплив теплових флуктуацій на квантові переходи між станами з різними кутовими моментами в тороїдальних Бозе-конденсатах зі слабкою ланкою, що обертається. Виведено формулу Ареніуса для імовірності

стохастичних переходів. Запропоновано новий метод розрахунку енергетичного бар'єру, що розділяє різні квантові стани надплинної системи. Параметри, за яких енергетичний бар'єр зникає, добре узгоджується з обчисленими раніше параметрами для детерміністичних переходів. Показано, що додавання теплових флуктуацій понижує поріг для квантових переходів [Snizhko K., Isaieva K., Kuriatnikov Y., Bidasyuk Y, Vilchinskii S, Yakimenko A. Stochastic phase slips in toroidal Bose-Einstein condensates. Phys. Rev. A, 2016. – Vol. 94. – P. 063642] *(С. Вільчинський, Є. Курятников, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, кафедра квантової теорії поля).*

Запропоновано механізм контрольованої трансформації дисипативних вихорів та вихрових комплексів в нелінійному дисипативному середовищі з накачуванням. Показано, що відповідно підібраний керуючий потенціал може переводити динаміку дисипативних нелінійних структур в режим спонтанної трансформації. Було проведено детальний аналіз і запропоновано метод контролю трансформації вихрових структур керуванням тривалості дії керуючого потенціалу. Запропоновано керуючі потенціали, що призводять до контрольованої трансформації топологічних збуджень у відкритих нелінійних середовищах. [B.A. Kochetov, O.G. Chelpanova, V.R. Tuz, A.I Yakimenko. *Spontaneous and engineered transformations of topological structures in nonlinear media with gain and loss.* Phys. Rev. E 100, 062202 (2019)] *(О. Челпанова, О. Якименко, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, кафедра квантової теорії поля).*

Спонтанна генерація вихорів – універсальна властивість відкритих та нелінійних систем. Досліджено вихрові кільця та вихрові лінії, що виникають при поширенні нелінійних хвильових пучків у нелокальному нелінійному середовищі. Продемонстрована можливість спонтанної генерації вихрових кілець на периферії радіально збуреного фундаментального солітона. Знайдено чисельні розв'язки у вигляді солітонів вищих порядків та досліджено їх стійкість та нелінійну динаміку. Продемонстровано можливість формування серії з пар вихрових кілець різного радіусу, що виникають у хвильовому полі збурених солітонів із вузлами [V. Biloshytskyi, A. Oliinyk, P. Kruglenko, A. Desyatnikov, A. Yakimenko. *Vortex nucleation in nonlocal nonlinear media.* Physical Review A 99 (4), 043835 (2019)] *(В. Білошицький, А. Олійник, О. Якименко, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, кафедра квантової теорії поля).*

Запропоновано новий метод регуляризації релаксаційних переходів, що індукуються середовищем у наноскопічних системах. Являючи сумісність з хаотичною, стохастичною та перехідною шкалами часу, метод є фізично послідовним та математично строгим. Він дозволяє коректно редукувати

еволюцію системи до керуючого рівняння балансу заселеностей її станів із ймовірностями переходів між станами, які добре задоволняють як температурно-незалежній границі, так й ареніусовій експоненційно температурно-залежній границі активаційного типу. Теоретичні результати застосовано до опису кінетики температурно-незалежних процесів десенситизації та деградації, що спостерігаються в рецепторних і циркадних білкових макромолекулах [V.I. Teslenko, E.G. Petrov, Ukr. J. Phys. 61, No. 7, 627 (2016)] *(Е.Г. Петров, В.І. Тесленко, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).*

Метод нерівноважної матриці густини для відкритої системи, що знаходиться в контакті з оточуючим середовищем, застосовано до розв'язку задачі максимізації ефективності дефектної системи шляхом мінімізації її чутливості до відмов у надійності в рамках абсорбуючого ланцюга Маркова. Шляхом максимізації коефіцієнта конкурентоздатності, який пов'язаний із залежністю піка заселеності нестаціонарного стану відмов системи від логарифму вхідної швидкості переходу, показано, що розраховані коефіцієнти конкурентоздатності крихких відмов для IR-оптоелектронних матеріалів добре узгоджуються з їх продуктивністю, отриманою з експериментів [V.I. Teslenko, O.L. Kapitanchuk, Mod. Phys. Lett. B 48, No. 3, 1850022 (2018)] (*В.І. Тесленко, О.Л. Капітанчук, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).*

Запропоновано загальний метод у теорії колоїдної нематостатики, що базується на універсальній Ґріновій функції. Це уможливлює просте формулювання теорії та обчислення усіх парних взаємодій між пружними мультиполями без інтегрування і диференціювання [V.M. Pergamenshchik, The model of elastic multipole, J. Mol. Liq. 267, 337 (2018)] *(В. Пергаменщик, ІФ НАН України).*

У твердому полімерному ланцюжку рух молекул обмежено голономними зв'язками, через які статистичний інтеграл не факторизується. Вперше пораховано статистичну суму такого ланцюжка з врахуванням кінетичних степенів руху, а також кореляційні функції швидкостей молекул [V.M. Pergamenshchik and A.B. Vozniak, Statistical model of a flexible inextensible polymer chain: the effect of kinetic energy, Phys. Rev. E 95, 012501-13 (2017)] *(В.М. Пергаменщик, ІФ НАН України, А.Б. Возняк, КНУ імені Тараса Шевченка).*

Досліджено компартментну та ґраткову версії епідеміологічної моделі SIS. Знайдено стаціонарні стани для випадку різного радіуса переносу інфекції між індивідами, що в неявний спосіб моделює їх мобільність. Показано, що

модель із випадковим у просторі і часі радіусом переносу може бути зведена до моделі з перенормованим постійним радіусом переносу. Отримано і досліджено структуру просторових паттернів інфікованих індивідів [J. Ilnytskyi, Y. Kozitsky, H. Ilnytskyi, O. Haiduchok, Stationary states and spatial patterning in an SIS epidemiology model with implicit mobility, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, Vol. 461, Iss.1, pp. 36-45 (2016), DOI: 10.1016/j. physa.2016.05.006] *(Я. Ільницький, ІФКС НАН України, Ю. Козицький, Університет Марії Кюрі-Склодовської, Люблін, Польща, Г. Ільницький, Львівський національний медичний університет ім. Д. Галицького, О. Гайдучок, Національний університет «Львівська політехніка»).*

Досліджено критичну поведінку розведеної 2D моделі Ізінга за наявності кореляції структурного безладу, які алгебраїчно загасають з відстанню як $\sim r^{-a}$. Така задача виникає при аналізі фазових переходів у двовимірних системах із так званими протяжними (extended) домішками. Прикладом можуть слугувати лінійні дислокації або межі зерен, вирівняні в просторі, чи випадкової орієнтації. Розглядаючи цю задачу як теорію 2D ферміонів Дірака з корельованим безладом ми застосовуємо метод теоретико-польової ренормалізаційної групи і в двопетлевому наближенні обчислюємо критичні властивості моделі [Maxym Dudka, Andrei A. Fedorenko, Viktoria Blavatska, Yurij Holovatch. Critical behavior of the 2D Ising model with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. B,* vol. 93 (2016) 224422] *(М. Дудка, В. Блавацька, Ю. Головач, ІФКС НАН України, А. Федоренко, Університет Ліона, Франція).*

Розглянуто скейлінгові властивості моделі C, що описує динамічну критичну поведінку n-компонентного незбережного параметра порядку статично взаємодіючого із скалярною збережною густиною в *D*-вимірному просторі. В рамках методу теоретико-польової ренормалізаційної групи проаналізовано умови, за яких реалізуються різні типи критичної поведінки – різні закони скейлінгу – в площині *(n, D)*. Межі, що розділяють ці ділянки, обчислюються на основі ренормгрупових функцій високого порядку в техніці ε-розкладу а також за допомогою підходу при фіксованій вимірності простору з пересумовуванням асимптотичних рядів [M. Dudka, R. Folk, Yu. Holovatch. Phase diagram of Model C in the parametric space of order parameter and space dimensions. *Phys. Rev. B* vol. 93 (2016) 094301] *(М. Дудка, Ю. Головач, ІФКС НАН України, Р. Фольк, Університет Лінца, Австрія).*

Досліджено перехід (кросовер) між дифузивно-обмеженою кооперативною поведінкою (яка характерна для одновимірних систем) та реакційно-обмеженою кооперативною поведінкою (яка характерна для багатовимірних систем) для коагуляційно-дифузивного процесу зі стохастичним скиданням (reset), що характеризується певною ймовірністю. З цією метою реакції

коагуляції розглядались на так званій ґратці Бете, яка для кількості найближчих сусідів $q=2$ вироджується в одновимірний ланцюжок, а для $q>2$ може описувати багатовимірну ґратку. На цей випадок за допомогою наближення бен-Аврахама-Глассера пошерено метод порожніх інтервалів, у якому в неперервній границі поведінка моделі описується скейлінговою (масштабною) змінною λ ($\lambda \to 0$ відповідає випадку ланцюжка, $\lambda \to \infty$ відповідає багатовимірному випадку). У стаціонарному випадку знайдено логарифмічні поправки до скейлінгу густини частинок при $\lambda \to \infty$, що очікувалось для системи при критичній вимірності. Розраховано перехідні (кросоверні) скейлінгові функції та ефективні критичні показники [D. Shapoval, M. Dudka, X. Durang, M. Henkel, Cross-over between diffusion-limited and reaction-limited regimes in the coagulation-diffusion process, *J. Phys. A*, 51 (2018) 425002] (*М. Дудка, Д. Шаповал, ІФКС НАН України; X. Durang, University of Seoul (Korea); M. Henke Université de Lorraine (France)).*

Проведено аналіз рівноважних властивостей адсорбату, утвореного внаслідок реакцій типу $A + B \to 0$ на одномірному ланцюжку з неоднорідно-розподіленими каталітичними властивостями, в рамках моделі ґраткового газу з реактивними обмеженнями. У нашій моделі частинки сортів A та B на ланцюжку перебувають у постійному обміні зі своїми резервуарами і реагують, коли частинки різного сорту знаходяться на сусідніх вузлах у присутності каталізатора. Це моделюється або вибором, що частина випадково вибраних зв'язків спричиняє реакції, або, що реакції активуються частиною випадково вибраних вузлів. Отримано точні вирази для тиску адсорбату в термодинамічній границі. Проаналізовано залежність густини адсорбату від значення активностей частинок та від коцентрації каталітичних елементів для двох випадків розміщення каталітичних елементів: за сценарієм відпаленого безладу та за сценарієм замороженого безладу [D. Shapoval, M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin, Equilibrium properties of two-species reactive lattice gases on random catalytic chains, Physical Review E. – Vol. 102, 032121 (2020)] *(М. Дудка, Д. Шаповал, ІФКС НАН України; G. Oshanin, O.Bénichou, CNRS, Франція).*

Розглянуто задачу про рівноважні властивості адсорбату, утвореного внаслідок реакцій типу $A + A \to 0$, що моделюються ґратковим газом на ґратці Бете, в якій певна кількість випадково вибраних елементів (вузлів або зв'язків) є каталітичними. Отримано фазову діаграму, яка показує існування впорядкованого стану адсорбату в системі в залежності від концентрації каталітичних елементів p та добутку хімпотенціалу частинок μ та оберненої температури β. Встановлено, що для значення p, яке перевищує певне критичне значення, зі збільшенням активності в системі можливий перехід другого роду з невпорядкованого стану у впорядкований стан, а при подальшому зростанні активності – зворотній перехід. Показано, що тоді як

для випадку каталітичних зв'язків зворотній перехід є другого роду, то для каталітичних вузлів він може бути першого роду в залежності від p. Розраховано поведінку тиску та сприйнятливості в даній системі в залежності від $\mu\beta$. [M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin, Order-disorder transitions in lattice gases with annealed reactive constraints, *J. Stat. Mech.* (2018) 043206] *(М. Дудка, ІФКС НАН України; G. Oshanin, O.Bénichou , CNRS, Франція).*

Розрахунок вільного об'єму в межах ближнього порядку з використанням парних кореляційних функцій вказує на те, що у випадку першої координаційної сфери вільний об'єм є меншим порівняно з його середнім значенням, розрахованим за експериментальними значеннями густини, тоді як вільний об'єм, обчислений в межах другої координаційної сфери є близьким за значенням до середнього, що вказує на короткодіючий характер міжатомної взаємодії в розплавах. Встановлено тристадійниний механізм збільшення вільного об'єму в розплавах в процесі нагрівання. На першій стадії поблизу температури плавлення вільний об'єм виникає у вигляді вакансій співмірних з розміром атомів; на другій − збільшення вільного об'єму зумовлено об'єднанням вакансій за рахунок дроблення кластерів; третя стадія пов'язана з руйнуванням кластерної будови розплавів та гомогенізацією рідини [V. Plechystyy, I. Shtablavyi, S. Winczewski, K. Rybacki, S. Mudry and J. Rybicki, Short-range order structure and free volume distribution in liquid bismuth: X-ray diffraction and computer simulations studies, Philosophical Magazine. – 2020. – V. 100, Issue 17. – P. 2165–2182] *(С. Мудрий, І. Штаблавий, ЛНУ імені Івана Франка, кафедра фізики металів).*

Виведено пов'язане рівняння квадратичного наближення моделі слабко взаємодіючого бозе-газу. Одне рівняння визначає густину конденсату як варіаційний параметр і забезпечує мінімум великого термодинамічного потенціалу. Друге забезпечує зв'язок між загальною кількістю частинок та хімічним потенціалом. Їх послідовний теоретичний аналіз проведено для низки модельних потенціалів взаємодії, включаючи контактні (локальні) та нелокальні взаємодії, де останні забезпечують нетривіальну поведінку в просторі імпульсів. Продемонстровано, що здобуті рівняння не мають розв'язків для локального потенціалу, хоча вони формально відтворюють загальновідомі результати підходу Боголюбова. У той же час показано, що для нелокальних потенціалів рівняння мають фізично значущі розв'язки. Показано, що в режимах, близьких до експериментально реалізованих в ультрахолодних атомарних газах, внесок доданків, що походять із квадратичної частини усіченого гамільтоніану, до хімічного потенціалу може мати однаковий порядок із внеском його с-числової частини. Завдяки цьому факту, зокрема, спектр одночастинкового збудження в квадратичному наближенні набуває щілини *(М.С. Булахов, О.С. Пелетминський, С.В. Пелет-*

минський, Ю.В. Слюсаренко, А.Г. Сотніков, Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України).

Вивчено систему багатьох взаємодіючих частинок зі спіном 1 у контексті однорідних ультрахолодних атомарних газів. Загалом для її опису потрібно вісім параметрів, серед яких є три компоненти намагніченості та п'ять параметрів, пов'язаних із квадрупольними ступенями свободи. На основі загальних міркувань щодо симетрії побудувано гамільтоніан взаємодії між частинками, який включає вісім генераторів групи SU(3), що співвідносяться із вищезазначеними параметами опису. Симетричний SU(3) гамільтоніан застосовується для вивчення феромагнітної та квадруполярної фаз однорідного слабко взаємодіючого газу атомів одиничного спіну за наявності конденсату Бозе-Ейнштейна. Показано, як квадрупольні ступені вільності, що входять до гамільтоніану, змінюють основний стан та спектри одночастинкових збуджень у порівнянні зі спектрами, здобутими з гамільтоніану, що квадрупольних ступенів вільності не враховує *(О.С. Пелетминський, С.В. Пелетминський, Ю.В. Слюсаренко, Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України).*

Проведено дослідження залежностей хімічних потенціалів від температури для ідеальних одноатомних газів зі статистиками Бозе–Ейнштейна та Фермі–Дірака в області температур, характерних для колективного ефекту квантового виродження. Поза рамками будь-яких додаткових наближень проведено чисельні розрахунки та побудовано залежності хімічних потенціалів від температури при фіксованій густині числа частинок газів. Здобуто наближені поліноміальні залежності хімічних потенціалів від температури, що дозволяють використовувати результати в наступних дослідженнях вже без залучення застосованих числових методів. Зручність використання отриманих залежностей продемонстровано на прикладах деформації розподілів для заселеності енергетичних станів при зниженні температури, а також впливу квантової статистики (обмінної взаємодії) на рівняння стану ідеальних газів та деякі їх термодинамічні характеристики. Результати даної роботи по суті об'єднують в проміжній області дві протилежні граничні можливості опису рівноважних станів ідеальних газів, що добре та давно відомі з університетських курсів статистичної фізики, тим самим складаючи цінність також і з педагогічної точки зору *(Ю.В. Слюсаренко, А.Г. Сотніков, К.В. Середа, Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України).*

Вивчено термодинамічні властивості слабко взаємодіючих бозе-газів над температурою переходу до станів із бозе-ейнштейнівським конденсатом у рамках термодинамічної теорії збурень. Як аналітично, так і в рамках числових мето-

дів проаналізовано випадки локальної й нелокальної взаємодії між частинками. Здобуто й проаналізовано температурні залежності хімічного потенціалу, ентропії, тиску й питомої теплоємності з точки зору впливу взаємодії на аналогічні характеристики ідеальниих газів *(А.Г. Сотніков, О.С. Пелетминський, М.С. Булахов, Ю.В. Слюсаренко, Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України).*

Побудовано теорію квазінейтральних рівноважних станів зарядів над плівками рідкого діелектрика. Ця теорія базується на перших принципах квантової статистики для систем багатьох тотожних частинок. Запропонований підхід передбачає застосування варіаційного принципу, модифікованого на випадок розглянутих систем, а також моделі Томаса – Фермі. У рамках запропонованої теорії здобуто рівняння самоузгодження, які забезпечують зв'язок між основними параметрами, що описують систему: потенціалом статичного електричного поля, функцією розподілу зарядів і профілю поверхні рідкого діелектрика. Рівняння застосовано для вивчення фазового переходу в системі до просторово-періодичного стану (аналог вігнерівських кристалів). Із використанням аналітичних і числових методів проведено детальне вивчення залежності критичних параметрів такого фазового переходу від фізичних характеристик системи, зокрема від товщини плівки рідкого діелектрика. Обговорено критерії стабільності можливих для даної системи асиметричних фаз *(Ю.В. Слюсаренко, Д.М. Литвиненко, Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України).*

За допомогою динамічної теорії середнього поля теоретично досліджено низькотемпературні фази та їх межі стабільності в газах, що складаються з атомів ітербію-173 з внутрішніми спіновими та орбітальними ступенями вільності. Теоретичний аналіз представлено в межах застосовності наближення сильного зв'язку за різних глибин ґратки та різних рівнів заповнення комірок атомами в основному та метастабільному збудженому орбітальному стані [A. Sotnikov, Y. Zambrano, and A. Cichy, Low-temperature phases in two-orbital Hubbard model realized with ultracold atoms in optical lattices, Acta Phys. Pol. A 138, 669 (2020)] *(А.Г. Сотніков, Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України; Й. Замбрано, А. Ціхи, Університет ім. А. Міцкевича, Познань, Польща).*

Досліджено термодинамічні властивості слабковзаємодіючого бозе-газу вище температури переходу до стану з конденсатом у рамках термодинамічної теорії збурень. Розглянуто випадки локальної та нелокальної взаємодії між атомами газу. Обраховано залежності хімічного потенціалу, тиску, теплоємності та порівняно з аналогічними залежностями для ідеального газу. Результати встановлюють надійні відправні точки для термодинамічних

характеристик і асимптотичної поведінки розріджених атомарних і молекулярних газів вище температури конденсації [M.S. Bulakhov, A.S. Peletminskii, Yu.V. Slyusarenko, and A.G. Sotnikov, Thermodynamics of a weakly interacting Bose gas above the transition temperature, Phys. Scr. 96 (2021) 045401] *(М.С. Булахов, О.С. Пелетминський, Ю.В. Слюсаренко, А.Г. Сотніков, Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України).*

Теоретично досліджено тенденцію до формації бозе-конденсату в газі заряджених бозонів (іонів) над поверхнею діелектрика. Формалізм розвинено в рамках теорії самоузгодженого поля, що поєднує квазікласичний опис у термінах вігнерівських функцій розподілу та квантово-механічний підхід, що базується на рівнянні Гросса-Пітаєвського. Передбачено виникнення стану з бозе-конденсатом та обчислено близькокритичні характеристики системи. Виявлено, що надконденсатні й конденсатні компоненти просторово відокремлюються за таких умов [I.V. Lukin, A.G. Sotnikov, and Yu.V. Slyusarenko, Aspects of Bose-Einstein condensation in a charged boson system over the dielectric surface, preprint arXiv:2011.10032] (*І.В. Лукін, Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна; А.Г. Сотніков, Ю.В. Слюсаренко, Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України).*

Розглянуто підходи, актуальні для побудови та використання математичних моделей у лінгвістиці. Досліджено основні принципи створення таких моделей. Зазначено, що ефективним виявляється підхід, який переважно застосовують у розв’язанні фізичних задач. Значну увагу приділено універсальності математичних моделей, які використовуються для аналізу задач лінгвістики. Досліджено методи побудови математичних моделей на основі закону Зіпфа, нейронних мереж та інших способів моделювння *(О.М. Васильєв, І. Васильєва, КНУ імені Тараса Шевченка, О.В.Чалий, НМУ ім. О.О. Богомольця).*

2. Фізика рідкого стану

Виконано цикли робіт з: **теорії зсувної в'язкості та самодифузії молекул в атомарних рідинах** типу аргону, рідких металах та розплавах, розплавах солей, у воді та водних розчинах електролітів, вспиртах метанолового гомологічного ряду та водно-спиртових розчинах; **дослідження природи особливої точки у водно-спиртових розчинах** (аналіз природи водневого зв'язку в одноатомних спиртах, специфіка рівняння стану спиртів в усій області існування їх рідких станів, поведінка густини, теплоємності, поляризовності та діелектричної проникності спиртів в залежності від порядкового номеру спирту в гомологічному ряду метанолу, визначення ступеня кластеризації водно-спиртових розчинів в околі їх особливих точок, особливості розповсюдження ультразвуку у водно-спиртових розчинах поблизу їх особливих точок, визначення розмірів і характерного часу життя мікронеоднорідних утворень в розчинах); **теорії термодинамічних властивостей води** (побудова усереднених потенціалів міжмолекулярної взаємодії у воді, формулювання узагальненого принципу подібності, згідно якого встановлюється аргоноподібний характер рівняння стану води, аналіз особливостей теплових збуджень кластерів у рідкій воді, прояв теплових збуджень кластерів у поведінці ентропії та теплоємкості води, а також в її статичній діелектричній проникності, природа максимуму густини рідкої води в точці 4 °C); д**ослідження структурних та фазових перетворень у водних розчинах біомолекул альбуміну** (визначення температурної та концентраційної залежностей ефективних розмірів макромолекул альбуміну за поведінкою зсувної в'язкості їх водних розчинів, прояв структурних перетворень макромолекул альбуміну в поведінці густини та зсувної в'язкості водних розчинів альбуміну, структурний фазовий перехід у водних розчинах альбуміну як свідчення димеризації та олігомеризації його молекул, залежності структурних перетворень у водних розчинах альбуміну від показника кислотно-лужного балансу pH, реакції pH розчинів на присутність вуглекислого газу та солей); д**ослідження процесів переносу в рідинах методами молекулярної динаміки** (визначення максвелівського часу релаксації аргону і води за різних значень температури і густини, визначення відносної величини колективних складових коефіцієнта самодифузії у аргоноподібних рідинах, до сімейства яких належить також вода, систематичне дослідження проміжної функції розсіяння за різних значень частоти та хвильового вектора, прояву обертального руху молекул води у спектрах некогерентного розсіяння повільних нейтронів, визначення положень бінодалі і спінодалі рідин за допомогою виявлення немонотонностей у поведінці кінетичних коефіцієнтів).

Опубліковано 38 статей, включених до бази даних Scopus, на основі оригінальних робіт надруковано три огляди: [Н.П. Маломуж, К.С. Шакун.

Коллективные составляющие процесса самодиффузии в жидкостях // УФН, 2021, 191, №2, 1–27 https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.05. 038759; L.A. Bulavin, N.P. Malomuzh, K.S. Shakun. Current problems in the quasi-elastic incoherent neutron scattering and the collective drift of molecules // In: Selected problems in physics of liquids, Springer, 2019, 223, 41–72; Л.А. Булавин, В.Я. Гоцульский, Н.П. Маломуж, В.Е. Чечко. Релаксационные и равновесные свойства разбавленных водных растворов спиртов // Известия РАН (серия химическая). – 2016, №4, 851–876] *(М.П. Маломуж, В.Я. Гоцульский, В.Е. Чечко, ОНУ імені І.І. Мечникова; Л.А. Булавін, КНУ імені Тараса Шевченка; К.С. Шакун, Одеська морська академія).*

Побудовано і протестовано багаточастинкові моделі ефективних електрофізичних властивостей дисперсних систем неоднорідних частинок із різною мікроструктурою. Застосовано розроблені моделі до реальних фізичних систем (тверді і полімерні композитні електроліти, суспензії наночастинок) для аналізу впливу мікроструктури і фізико-хімічних процесів у конкретній системі на її ефективні електричну провідність і діелектричної проникність. Застосовано метод компактних груп неоднорідностей, в рамках якого система розглядається як сукупність макроскопічних областей (компактних груп), які є точковими по відношенню до зондувального поля, але достатньо великими, щоб їх макроскопічні властивості збігалися з властивостями всієї системи. Цей метод протягом звітного періоду узагальнено в двох напрямах: наведено загальні аргументи, які дозволили внутрішньо замкнути обчислювану процедуру; а також обґрунтовано його застосовність до систем з провідними компонентами. Докладно проаналізовано модельні системи двох типів: 1) дисперсну систему твердих неоднорідних частинок та дисперсну систему частинок з морфологією тверде ядро – радіально неоднорідна проникна оболонка (з домінуванням ближчих шарів оболонки над більш далекими у випадку перекривання оболонок). Продемонстровано, що отримані результати дозволяють відновити строгі аналітичні результати і числові симуляції інших авторів для цих систем та спроможні адекватно описати експеримент. На основі обробки експериментальних даних для концентраційної і температурної залежностей електричної провідності твердих і полімерних композитних електролітів аргументовано, що вигляд модельного розподілу електричної провідності оболонок ефективно відображає вплив різних фізико-хімічних механізмів на формування електричних властивостей системи. Виокремлення цього розподілу з експериментальних даних відкриває можливість для ідентифікації та оцінки ролі найбільш суттєвих механізмів формування електрофізичних властивостей реальних гетерогенних систем і композитів [M.Ya. Sushko. Effective dielectric response of dispersions of graded particles. Phys. Rev. E, 2017, 96, 062121: 8; M.Ya. Sushko, A.K. Semenov. A mesoscopic model for the

effective electrical conductivity of composite polymeric electrolytes. J. Mol. Liq., 2019, 279, 677–686; M.Ya. Sushko, A.K. Semenov. Rigorously solvable model for the electrical conductivity of dispersions of hard-core–penetrable-shell particles and its applications. Phys. Rev. E, 2019, 100, 052601: 14] *(М.Я. Сушко, А.К. Семенов, ОНУ імені І.І. Мечникова).*

Показано, що *p*-хвильова надплинність може бути реалізована в суміші ферміонів та $F = 1$ бозоних газів. Отримано загальну систему рівнянь на енергетичну щілину в *s* та *p* каналах. Показано, що спін-спінова взаємодія між бозонами та ферміонами призводить до переважно *p*-хвильового спарювання між ферміонами і пригнічує спарювання в *s* каналі. Рівняння на щілину для полярної фази *p*-хвильової надплинної системи ферміонів розв'язано чисельно. Отримані результати відкривають можливості для експериментальної реалізації *p*-хвильової надплинності [O.I. Matsyshyn, A.I. Yakimenko, E.V. Gorbar, S.I. Vilchinskii, V.V. Cheianov p-wave superfluidity in mixtures of ultracold Fermi and spinor Bose gases Phys. Rev. A 98 (4), 043620 (2018)] *(С. Вільчинський, О. Якименко, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, кафедра квантової теорії поля).*

Досліджено поведінку іонної рідини в плоскій порі при відсутності прикладеної напруги на основі моделі двосортного ґраткового газу з відштовхувальними взаємодіями на ґратці Бете. Для великих значень хімпотенціалу μ отримано лінію фазових переходів другого роду з невпорядкованого у впорядкований стан у залежності від взаємодії між частинками. При зменшенні хімпотенціалу ця лінія закінчується трикритичною точкою при μ_c і при подальшому зменшенні хімпотенціалу переходи з невпорядкованого у впорядкований стан є переходами першого роду. Розраховано поведінку густини та стисливості в залежності від хімпотенціалу [M. Dudka, S. Kondrat, A. Kornyshev, G. Oshanin, Phase behaviour and structure of a superionic liquid in nonpolarized nanoconfinement, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28 (2016) 464007] *(М. Дудка, ІФКС НАН України; G. Oshanin, CNRS, Франція, A.A. Kornyshev, Imperial College London, Великобританія, S. Kondrat, Forschungszentrum Jülich, Німеччина та Institute of Physical Chemistry PAS, Польща).*

Проведено комплекс досліджень структури рідких і аморфних металевих та напівпровідникових сплавів, вивчення їх фізичних властивостей, чутливих до атомної та електронної будови, з використанням методу дифракції X-променів (звичайна та малокутова дифракція), комп'ютерних методів (MD та RMC), а також вимірювання густини поверхневого натягу, в'язкості, електропровідності та термо-е.р.с. Інтерпретацію отриманих результатів здійснено комплексно з врахуванням усіх вищезазначених методів дослідження як

якісно так і кількісно *(С. Мудрий, ЛНУ імені Івана Франка, кафедра фізики металів).*

Досліджено температурну залежність структури ближнього порядку рідких напівметалів (In, Bi, Ga, Sn, Sb), які після переходу з твердого стану в рідкий виявляють структурну мікронеоднорідність, кількісні параметри якої на сьогодні ще не встановлені. При цьому використано кластерну модель будови розплавів і враховано особливості профілю першого максимуму структурного фактора, що дало можливість розрахувати відносну частку кластерів кожного типу і їхні парціальні структурні параметри. Аналізуючи результати кількісної оцінки структурної мікронеоднорідності рідких розплавів In, Ga, Sn і Bi встановлено, що поблизу температури кристалізації структура In характеризується двома типами металевих кластерів із різним ближнім порядком, а рідкі Ga, Sn та Bi виявляють існування металевих та ковалентних кластерів у широкому температурному інтервалі після плавлення *(С. Мудрий, Р. Білик, У. Людкевич, ЛНУ імені Івана Франка, кафедра фізики металів).*

Для однокомпонентних розплавів на основі температурної залежності середніх міжатомних відстаней розраховано коефіцієнти термічного розширення, які для більшості досліджуваних рідких металів виявили аномальну поведінку. Зокрема, виявлено в деяких із них від'ємні значення коефіцієнта термічного розширення в межах першої координаційної сфери, причиною якого є вплив вільного об'єму. Встановлено знакозмінну поведінку коефіцієнта термічного розширення однокомпонентних розплавів у межах першої координаційної сфери, яка не проявляється на температурній залежності макроскопічного коефіцієнта термічного розширення, оціненого з температурної залежності густини. Отримані температурні залежності основних структурних параметрів задовільно пояснюються положеннями теорії вільного об'єму, відповідно до якої зменшення середніх міжатомних відстаней при зростанні температури одночасно зі зменшенням густини можна пояснити збільшенням вільного об'єму в розплаві поза межами першої координаційної сфери *(С. Мудрий,У. Людкевич, І. Штаблавий, ЛНУ імені Івана Франка, кафедра фізики металів).*

Вивчено трансформацію структури ближнього порядку рідких металів при формуванні на їх основі багатокомпонентних систем і в тому числі високоентропійних сплавів. Вперше показано що зі зростанням кількості компонент у багатокомпонентному біляеквіатомному сплаві ступінь хімічного впорядкування структури зменшується зі зростанням кількості компонент. Показано, що при переході від бінарного розплаву Ga-Sn до багатокомпонентного еквіатомного розплаву InBiGaSn структура ближнього порядку стає більшою мірою мікронеоднорідною, що спричинено існуванням, крім атомар-

ного розчину, також кластерів на основі чистих компонент і хімічно впорядкованих кластерів індію з вісмутом, що приводить до деякого зменшення конфігураційної ентропії змішування. Результвти вимірювання температурної залежності коефіцієнта поверхневого натягу дали змогу розрахувати поверхневу ентропію, значення якої засвідчили зростання ступеня впорядкування структури поверхневого шару високоентропійного сплаву при збільшенні кількості компонент. Залежність коефіцієнта поверхневого натягу для високоентропійногог сплаву InPbGaSnCu, у поєднанні з результатами Х-променевого аналізу показали, що присутність атомів міді призводить до руйнування самоасоційованих кластерів і до утворення хімічно впорядкованих груп атомів *(С. Мудрий, Р. Білик, Ю. Кулик, І. Штаблавий, ЛНУ імені Івана Франка, кафедра фізики металів).*

Для вивчення впливу мікронеоднорідностей, які виникають за рахунок наявності кристалічних частинок, на структуру розплавів проведено дифракційні дослідження композитів із рідкою матрицею. Показано, що ступінь відхилення структури композитів із рідинною матрицею від топологічної та хімічної однорідності головним чином визначається ступенем змочуваності кристалічних частинок матричним розплавом та можливістю дифузійного розчинення кристалічної фази в розплаві. Так, незважаючи на те, що введення нано- та мікрочастинок нікелю до розплавів сприяє збільшенню ступеня мікронеоднорідності на мезорівні, на атомному рівні спостерігається зменшення вільного об’єму при збільшенні вмісту кристалічних частинок, а нагрівання композиту веде до збільшення вільного об’єму лише в межах першої координаційної сфери [I. Shtablavyi, S. Mudry, O. Kovalskyi, P. Demchenko, R. Serkiz, M. Łapiński and Yu. Klanichka, Formation of intermetallic compounds in the solid-liquid composites of the Ga-Ni system, Mater. Res. Express. – 2018. – 5. – 116532] *(С. Мудрий, І. Штаблавий, ЛНУ імені Івана Франка, кафедра фізики металів).*

Проведено дослідження структури аморфних металічних сплавів на прикладі двох груп – аморфних сплавів на основі алюмінію та сплавів на основі 3-d елементів. Перша група відноситься до матеріалів, актуальних для авіаційної техніки, а друга – виявляє магнітні властивості. Проведено термічну обробку сплавів, що дало змогу контрольованим чином отримувати нанокристали необхідних параметрів, а також квазікристалічні фази ікосаедричного типу. Найбільше схильними до формування квазікристалів виявилися сплави системи Al-V, а також потрійні сплави на їх основі. Встановлено, що швидке гартування алюмінієвих сплавів, склад яких відповідає загальній формулі $Al_{100-3x}V_{2x}Fe_x$, приводить до формування нанокристалічної алюмінієвої матриці, в якій одночасно утворюються дві квазікристалічні ікосаедричні фази з різними значеннями параметрів квазіґраток. Виявлено, що зростання вмісту

перехідного металу у сплавах $Al_{100-3x}V_{2x}Fe_x$ сприяє збільшенню вмісту квазікристалічної фази з більшим значенням параметра квазіґратки, що в свою чергу сприяє підвищенню інтегральної мікротвердості майже в чотири рази при збільшенні сумарного вмісту перехідних елементів від 6 до 12 ат. %. Також вивчено вплив лазерного опромінення на структуру аморфних металевих сплавів на основі алюмінію. Показано що імпульсне лазерне опромінення призводить до утворення нанокристалічних фаз, які суттєво покращують механічні властивості. Крім того досліджено процес формування лазерно-індукованих періодичних структур на поверхні аморфного сплаву, а також вплив водню на процеси фазових перетворень в алюмінієвих аморфних сплавах *(С. Мудрий, ЛНУ імені Івана Франка, кафедра фізики металів).*

Досліджено особливості аномальної поведінки поширення та розсіяння ультразвуку у водно-спиртових розчинах поблизу особливих точок, що дозволило отримати такі результати: а) проведено експериментальне дослідження швидкості поширення ультразвуку у водному розчині 2-пропилового спирту в інтервалі температур (293–343) К та частот (10÷1800) МГц; б) особлива точка розчину визначається як точка перетину кривих концентраційних залежностей швидкості поширення та коефіцієнта поглинання ультразвуку за різних температур, частот, концентрацій і дорівнює $X_c = 0.03 \div 0.01$, $T_c = 313.0$ К; в) гідрофобна взаємодія та водневі зв'язки відповідають за структурний фазовий перехід, який описується відомим сценарієм «критичної точки рідина-рідина», котрий відбувається в околі 40 °С, коли вода змінює свою структуру; г) основна причина аномальної поведінки водно-спиртових розчинів поблизу особливих точок дозволяє підтвердити гіпотезу про «механізм флуктуюючих кластерів», що безпосередньо пояснює наявність двох важливих ефектів, а саме: аномального зростання не тільки інтегральної інтенсивності молекулярного розсіювання світла, але й аномального збільшення молекулярного розсіяння ультразвуку *(Л.А. Булавін, КНУ імені Тараса Шевченка, О.В. Чалий, НМУ ім. О.О. Богомольця, О.І. Білоус, МАУ).*

3. Рідкі кристали

Показано, що молекули барвника в рідинному кристалі утворюють лінійні аґреґати, які мають квантову структуру, схожу на напівпровідникову. Поглинаючи фотон, вони сильно поляризуються і взаємодіють з електричним полем світла. Тоді на аґреґати діє момент, який створює деформації директора, і аґреґати взаємодіють один з одним. Повертаючись відносно поля, система збільшує ентропію, що пояснює аномально сильний ефект пониження порогу світло-індукованого переходу Фредерікса в рідинних кристалах, допованих певними барвниками [V.M. Pergamenshchik, V.V. Multian, V.Ya. Gayvoronsky,

V.A. Uzunova, S.V. Kredentser and V.G. Nazarenko, Interaction of supramolecular aggregates and the enhanced optical torque on the director in a dye doped nematic liquid crystal, Soft Matter, 15, 8886 (2019)] *(В. Пергаменщик, В. Мультян, В. Гайворонський, В. Узунова, С. Креденцер, В. Назаренко, ІФ НАН України).*

Кулясті колоїдні частинки на поверхні нематика спонтанно утворюють різноманітні структури: ґексагональні і анізотропні ґратки, ланцюжки, які іноді відштовхуються, а іноді притягаються і, за певних умов, утворюють великі круглясті кластери. Ієрархію цих структур пояснено взаємодією пружних диполів двох різних типів, що їх утворюють частинки, а також колективною далекосяжною взаємодією [N. Wang, J.S. Evans, Ch. Li, V.M. Pergamenshchik, I.I. Smalyukh, and Sailing He, Controlled Multistep Self-Assembling of Colloidal Droplets at a Nematic Liquid Crystal–Air Interface, Phys. Rev. Lett. 123, 087801 (2019)] *(В. Пергаменщик, ІФ НАН України).*

Розроблено гнучкі прототипи сенсорів вологості на основі ліотропних хромонічних рідких кристалів. Слабко пов'язані хромонічні агрегати, осаджені шляхом друку на гнучкій підкладці, можуть підтримувати деформацію підкладки, не втрачаючи їх орієнтованої структури. У той же час структура зі слабо взаємодіючими молекулами повинна відображати сильну реакцію електропровідності на зміни навколишнього середовища, такі, як зміна вологості. На основі реакції електропровідності ЛХРК на зміну навколишнього середовища передбачається створення низки чутливих пристроїв. Отримані дані показують, що відстань між молекулами в агрегатах сильно залежить від вологості навколишнього середовища, оскільки зміна вмісту води змінює слабкі ковалентні гідрофобні та гідрофільні взаємодії між молекулярними групами. Зміна вологості призводить до різкої зміни електричного струму вздовж агрегатів. Реакція електричного струму на підвищену вологість настає дуже швидко, менше 100 мсек; час відновлення становить близько 10 с. Ключовими перевагами пропонованого підходу є: просте виготовлення за допомогою друку; висока чутливість та швидка реакція; екологічно чисте виробництво пов'язане з водою, що використовується як розчинник. Дослідження проводяться у співпраці з Колорадським університетом в Колорадо-Спрінгс [Yu.A. Nastishin, V.I. Savaryn, E. Lychkovskyy, M. Yu. Yakovlev, P.I. Vankevych, O.M. Krupych, V.I. Hrabchak, O.P. Boiko, V.G. Nazarenko, O.D. Lavrentovich, Effect of UV-light irradiation on phase diagram of lyotropic chromonic liquid crystal, J. Mol. Liq. 2018, Vol. 267, p. 96–99. DOI:10.1016/j.molliq.2017.12.079; A. Glushchenko, O.P. Boiko, B.Ya. Lenyk, A. Senenko, and V.G. Nazarenko, Humidity sensing with printable films of lyotropic chromonic liquid crystals, Appl. Phys. Lett. 117, 071902 (2020)] *(В. Назаренко, О. Бойко, А. Сененко, Інститут фізики НАН України).*

Досліджено ліотропні хромонічні рідкі кристали (LCLC), які утворюються плоскими поліароматичними молекулами з іонними групами на периферії. Використовуючи циклічну вольтамметрію (CV), показано, що як позитивно, так і негативно заряджені мезогенні матеріали демонструють зниження енергетичних позицій порівняно з класичним хімічно схожим немезогенним матеріалом. Отримані результати свідчать про те, що нековалентна взаємодія між зарядженими молекулами впливає на зниження найнижчої незайнятої молекулярної орбіталі. Отримані результати вказують на ефективний спосіб розробки перспективних нефулеренових акцепторів для органічних сонячних батарей. Дослідження проводяться у співпраці з Інститутом фізичної хімії НАН України [Oleksandr P. Boiko, Bohdan Ya. Lenyk, Oleg Yu. Posudievskiy, Yurii. L. Slominskiy, Sergii A. Tsybulia, Yuriy A. Nastishin, Vassili G. Nazarenko, Electronic energy levels in lyotropic chromonic liquid crystals formed by ionic perylene diimide derivatives. Synthetic Metals 257 (2019) 116147] *(В. Назаренко, О. Бойко, О. Посудієвський, Інститут фізики НАН України).*

Звичайні лінзи з електричним приводом з орієнтованим нематичним рідким кристалом (НРК) як чутливим матеріалом демонструють значно ширший діапазон показника заломлення, а отже, і зміну фокусної відстані в порівнянні з твердими аналогами, але, як відомо, вони значно поступаються своєю робочою швидкістю. Нами представлено електроадаптивні лінзи в комірці, зібраній із двох плоских скляних підкладок. Одна підкладка містить плоскоопуклу полімерну лінзу, виготовлену з фоторезисту, а друга містить плоско-увігнуту лінзу, сформовану з використанням LC полімерної системи. Під напругою, прикладеною до внутрішніх поверхонь підкладок комірки, НЖК переорієнтується, показник її заломлення змінюється, і, отже, фокусні відстані такої плоско-увігнуто-опуклої лінзи зменшуються приблизно з 360 мм при нульовій напрузі до 155 мм при високій (приблизно 60 В) напруги. Перевага напруженого стану РК дозволяє зменшити час увімкнення (увімкнення–вимкнення) до 2–3 мс, що більш ніж на порядок нижче в порівнянні зі звичайними лінзами NLC. Дослідження проводяться у співпраці з Колорадським університетом в Колорадо-Спрінгс та Єрусалимським технологічним коледжем [O. Kurochkin, O. Buluy, N. Aryasova, V. Nazarenko, J. Varshal, M. Manevich, J.L. West, Yu. Reznikov, Concentration dependence of phase retardation and optical response of stressed liquid crystal systems based on nematic liquid crystal pentyl-cyanobiphenyl, J. Mol. Liq. 2018, v. 267, pp. 115119 DOI: 10.1016/j.molliq.2018.01.046; O. Kurochkin, O. Buluy, J. Varshal, M. Manevich, A. Glushchenko, J. L. West, Yu. Reznikov, and V. Nazarenko, Ultra-fast adaptive optical micro-lens arrays based on stressed liquid crystals, J. Appl. Phys., Vol. 124, p. 214501 (1–6), 2018; O. Kurochkin, O. Buluy, V. Nazarenko, Yu. Nastishin, J. Varshal & M. Manevich, Ultra-fast liquid crystal lens with variable focal length, MCLC, 2020, v. 696, N. 1,

29, https://doi.org/10.1080/15421406.2020.1731091] *(В. Назаренко, О. Курочкін, О. Булуй, Інститут фізики НАН України).*

Встановлено наявність надмолекулярних агрегатів барвника в рідкому кристалі. Запропоновано принципово нову термодинамічну модель переорієнтації директора нематичного рідкого кристалу з домішками барвника в електромагнітному полі. Ентропія системи агрегатів у цьому випадку є функцією орієнтації агрегата відносно директора та поля світлової хвилі. Експериментально зафіксовано рекордно низький поріг орієнтаційної нелінійності в нематичному кристалі з домішками барвника [V.M. Pergamenshchik, V.V. Multian, V.Ya. Gayvoronsky, V.A. Uzunova, S.V. Kredentser and V.G. Nazarenko, Interaction of supramolecular aggregates and the enhanced optical torque on the director in a dye doped nematic liquid crystal. Soft Matter, 2019, 15, 8886] *(В.Г. Назаренко, В.М. Пергаменщик, В.Я. Гайворонський, ІФ НАН України).*

Показано, що при внесенні допантів у ліотропні рідкокристалічні фази модельних фосфоліпідних мембран їх мембранотропна дія, тобто вплив на температури фазових переходів, може бути не тільки неадитивною (тобто, з антагонізмом або синергізмом викликаних ефектів), але також некомутативною та неасоціативною (істотне значення має порядок внесення допантів, а також є різниця між одночасним та роздільним внесенням). Запропоновано відповідний механізм, за яким допант, що вноситься першим, спричиняє модифікацію надмолекулярного впорядкування в фосфоліпідному бішарі, що може якісно змінювати мембранотропну дію наступних допантів [N.A. Kasian, O.V. Vashchenko, L.V. Budianska, R.Ye. Brodskii, L.N. Lisetski. Thermodynamics and kinetics of joint action of antiviral agent tilorone and DMSO on model lipid membranes // Biochim. Biophys. Acta, 2019, V. 1861, p. 123–129. DOI: 10.1016/j.bbamem.2018.08.007] *(Н.О. Касян, О.В. Ващенко, Л.В. Будянська, Р.Є. Бродський, Л.М. Лисецький, Інституті сцинтиляційних матеріалів НАН України).*

Показано, що при внесенні слабкорозчинних органічних речовин біологічного походження в термотропні рідкі кристали процес розчинення супроводжується агрегацією молекул, причому оптичні і термодинамічні властивості утворених систем є якісно подібними до суспензій наночастинок у відповідних матрицях [A.N.Samoilov, S.S Minenko, O.Ye. Sushynskyi, L.N. Lisetski, N.I. Lebovka. Optical and calorimetric studies of quercetin-doped liquid crystals: Effects of molecular aggregation. J.Mol.Liq., 2019, v.295, p.111689-1-8. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.111689] *(Л.М. Лисецький, Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України, М.І. Лебовка, Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України).*

Віднайдено аномальний мінімум оптичної густини від концентрації вуглецевих нанотрубок в холестеричних рідких кристалах на залежностях типу Бугера-Ламберта-Бера, що пов'язано зі специфічними особливостями агрегації нанотрубок у спірально закручених рідкокристалічних середовищах [L.N. Lisetski, S.S. Minenko, A.S. Samoilov, N.I. Lebovka. Optical density and microstructure-related properties of photoactive nematic and cholesteric liquid crystal colloids with carbon nanotubes. // J. Mol. Liq., v. 235, p. 90–97 (2017). 10.1016/j.molliq. 2016.11.125; A.N. Samoilov, S.S. Minenko, L.N. Lisetski, M.S. Soskin, S.I. Torgova, N.I. Lebovka. Anomalous optical properties of photoactive cholesteric liquid crystal doped with single-walled carbon nanotubes. // Liq. Cryst., v. 45, No. 2, p. 250–261 (2018) DOI: 10.1080/02678292. 2017.1314560] *(Л.М. Лисецький, Інституті сцинтиляційних матеріалів НАН України, М.І. Лебовка, Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України).*

Визначено особливості впливу наночастинок на оптичні властивості рідкокристалічних середовищ у залежності від типу їх геометричної анізометрії та взаємодії зі структурними елементами матриці [L.A. Bulavin, L.N. Lisetski, S.S. Minenko, A.N. Samoilov, V.V. Klepko, S.I. Bohvan, N.I. Lebovka. Microstructure and optical properties of nematic and cholesteric liquid crystals doped with organo-modified platelets. // J. Mol. Liq., v. 267, p. 279–285 (2018). DOI: 10.1016/j.molliq.2017.12.078] *(Л.А. Булавін, КНУ імені Тараса Шевченка, Л.М. Лисецький, Інституті сцинтиляційних матеріалів НАН України, М.І. Лебовка, Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України).*

Розроблено теоретичну модель, що описує підсилення енергії на дифракційній ґратці в гібридній фоторефракційно-холестеричній (ФХ) комірці, стабілізованій в планарному стані полімерною сіткою. Поле падаючих на комірку променів світла, що інтерферують між собою, проникає у ФХ-комірку і взаємодіє зі зарядженими рухомими фібрилами полімерної сітки. Зв'язування світлових променів на індукованій ґратці директора холестеричного рідкого кристалу (ХЖК) приводить до підсилення енергії слабкого сигнального променя. Показано, що коефіцієнт підсилення в ХЖК може досягати значень, які на порядок вищі отриманих у твердих фоторефрактивних кристалах [*Director grating and two-beam energy exchange in a hybrid photorefractive cholesteric cell with a helicoidal polymer network, V.Yu. Reshetnyak, I.P. Pinkevych, M.E. McConney, D.R. Evans, J. Appl. Phys. Vol. 127, 125502 (2020)*] *(В.Ю. Решетняк, І.П. Пінкевич, КНУ імені Тараса Шевченка, M.E. McConney, D.R. Evans, Air Force Research Laboratory, Materials and Manufacturing Directorate, Wright-Patterson Air Force Base, Ohio, USA).*

Показано, що залежність коефіцієнта посилення пучка сигналу від періоду ґратки, що спостерігається в холестеричному рідкому кристалі (ХРК), може

виникати в рідкокристалічній комірці при скручуванні директора РК лише тоді, коли флексоелектричний параметр r2 є негативним. Для типових параметрів гібридних РК-комірок, що експериментально використовуються для двопроменевого енергетичного обміну, холестеричний тип періоду ґратки може з'являтися, коли крок спіралі директора стає меншим, ніж товщина комірки. Якщо параметр r2 позитивний, залежність коефіцієнта підсилення від періоду ґратки директора на будь-якому холестеричному кроці має характер, який спостерігається в нематичному РК. При малому скручуванні директора РК таким чином, що крок спіралі директора помітно перевищує товщину комірки, вплив параметра r2 на коефіцієнт підсилення стає незначно малим [*Impact of the liquid crystal director twisting on two-beam energy exchange in a hybrid photorefractive inorganic-liquid crystal cell, V.Yu. Reshetnyak, I.P. Pinkevych, M.E. McConney, J. E. Slagle, D. R. Evans, Crystals, Vol. 10, 1104 (2020)*] (*В.Ю. Решетняк, І.П. Пінкевич, КНУ імені Тараса Шевченка, M.E. McConney, J.E. Slagle, D.R. Evans, Air Force Research Laboratory, Materials and Manufacturing Directorate, Wright-Patterson Air Force Base, Ohio, USA).*

В інфрачервоній області спектру (1–5 мкм) розраховано коефіцієнти відбиття та пропускання наносмужкової ґратки на основі оксиду індію олова (ITO), розміщеної між нематичним рідким кристалом (РК) та ізотропним діелектриком. При використанні ґратки ITO з періодом 300–750 нм отримано піки в спектрах відбиття та пропускання, які є результатом збудження поверхневих плазмонів (ПП) в наносмужках ITO. Показано, що довжина хвилі ПП зростає зі збільшенням періоду ґратки та співвідношення ширини смужки та періоду ґратки і зменшується зі збільшенням концентрації 2D-електронів та часу релаксації електронів, а також що стан орієнтації РК-шару у верхній частині ITO-ґратки впливає на величину плазмонного піку в спектрі відбиття. Переорієнтація директора РК зі скрученого в гомеотропний стан дозволяє вмикати/вимикати збудження ПП. Отримані в моделі з використанням методу нескінченно тонкої ґратки дані порівняно за допомогою програмного забезпечення COMSOL із результатами, отриманими для ґратки ITO товщиною 120 нм і показано, що ця спрощена модель досить добре описує спектральне положення резонансних піків та їхню величину [*Modelling the surface plasmon spectra of an ITO nanoribbon grating adjacent to a liquid crystal layer, V.Yu. Reshetnyak, V.I. Zadorozhnii, I.P. Pinkevych, T.J. Bunning, D.R. Evans, Materials, Vol. 13, 1523 (2020)*] (*В.Ю. Решетняк, В.І Задорожний, І.П. Пінкевич, КНУ імені Тараса Шевченка, T.J. Bunning, D.R. Evans, Air Force Research Laboratory, Materials and Manufacturing Directorate, Wright-Patterson Air Force Base, Ohio, USA).*

Розроблено теорію, що описує двопроменевий енергетичний обмін у гібридній фоторефракційній холестеричній комірці зі світлочутливими молекулами. Розглянуто структуру, в якій шар холестеричного рідкого кристалу розміщений між двома неорганічними підкладками, одна з яких є фоторефрактивною. Періодична модуляція директора рідкого кристалу (РК-гратка), що виникає в комірці, являє собою суму двох синфазних ґраток – ґратки, керованої флексоелектричним ефектом, та ґратки, керованої фототрансформованими молекулами. Показано, що легування РК фоточутливими молекулами може забезпечити можливість контролю коефіцієнта підсилення при двопроменевому обміні енергії в розглянутій гібридній холестеричній комірці [Impact of photo-transformed molecules on two-beam energy exchange in hybrid photorefractive cholesteric cells, V.Yu. Reshetnyak, I.P. Pinkevych, D.R. Evans, Journal of Molecular Liquids, Vol. 267, (2018) 45–55] ***(****В.Ю. Решетняк, І.П. Пінкевич, КНУ імені Тараса Шевченка, D.R. Evans, Air Force Research Laboratory, Materials and Manufacturing Directorate, Wright-Patterson Air Force Base, Ohio, USA).*

Розроблено теоретичну модель для опису двопроменевого обміну енергією в гібридній фоторефрактивній холестеричній комірці зі спіраллю з коротким кроком, орієнтованою паралельно підкладкам комірки. Показано, що в полі просторового заряду, що проникає в холестеричний рідкий кристал (ХРК) від фоторефрактивної підкладки і взаємодіє з флексополяризацією ХРК, вісь спіралі ХРК може бути просторово промодульована в площині, паралельній підкладкам комірки РК, з періодом $2\pi / q$, де q – хвильове число картини інтенсивності. Залежність коефіцієнта підсилення пучка сигналу від періоду ґратки в ХРК із коротким кроком та віссю спіралі, паралельною підкладкам комірки, суттєво відрізняється від залежності в ХРК із віссю спіралі, перпендикулярною до підкладки комірки. У випадку осі спіралі, паралельної підкладкам комірки, ця залежність подібна до тієї, яка спостерігається в гібридних фоторефракційних комірках, заповнених нематичними РК [*Flexoelectro-optic effect and two-beam energy exchange in a hybrid photorefractive cholesteric cell with a short-pitch horizontal helix, V.Yu. Reshetnyak, I.P. Pinkevych, D.R. Evans, Physical Review E, Vol. 97, 062701 (2018)*] ***(****В.Ю. Решетняк, І.П. Пінкевич, КНУ імені Тараса Шевченка, D.R. Evans, Air Force Research Laboratory, Materials and Manufacturing Directorate, Wright-Patterson Air Force Base, Ohio, USA).*

4. Макромолекулярні та біологічні системи

Досліджено фазову рівновагу типу рідина-рідина в водяних розчинах білка лізоцим. З цією метою побудовано теоретичні моделі для потенціалу взаємодії між білками. Показано, що форма білка є ключовою для опису як структури водяного білкового розчину, так і його фазової поведінки *(А. Баумкетнер, Р. Мельник, М. Головко, ІФКС НАН України).*

За допомогою методу Больцманівської інверсії отримано потенціал взаємодії для білка лізоцим при pH = 2 та T = 298 K. Показано, що отриманий потенціал добре описує експериментально спостережувані структурні зміни, що відбуваються в системі з ростом концентрації. Знайдено, що досліджувана система утворює кластери, чия форма змінюється з ростом концентрації. Також знайдено, що при великих концентраціях спостерігається кінетичний перехід в не-ергодичний стан, який виникає внаслідок гідродинамічних взаємодій між молекулами лізоцим *(А. Баумкетнер, ІФКС НАН України, В. Кай, Університет Соузерн Методіст, Даллас, Техас).*

Досліджено спектри затриманої люмінесценції полімерних ланцюжків на основі мономерів глюкози, а саме д-глюкози, амілози та целюлози. Показано, що відмінності в спектрах затриманої люмінесценції зумовлені відмінностями у вторинній структурі цих полімерів, а саме від типу зв'язків між мономерами та кількістю мономерів в елементарній комірці. Через такі відмінності в структурі в них існують різні типи автолокалізованих електронних станів з різними параметрами, що і визначають домінуючий вклад в спектри затриманої люмінесценції [R. Grasso, F. Musumeci, A. Triglia, L. Brizhik, A. Scordino. Impact of structure on the delayed luminescence of D-Glucose-based polymer chains, J. Photochem. Photobiol. B: Biol. 2019, 198, 111589 (9 pp); *https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2019.111589*; Rosaria Grasso, Francesco Musumeci, Larissa Brizhik, Agata Scordino. Delayed luminescence and its dependence on nonlinear organized structures based glucose monomers. Advanced Photonics 2018 Congress. Nonlinear Photonics: Nonequilibrium systems, active and driven nonlinear photonic structures. (Zurich, Switzerland, 2–5 July 2018). Zurich, 2018, pp. 45–51] *(Л.С. Брижик, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).*

Спираючись на квантову електродинаміку та теорію нелінійних систем, розвинуто модель, що пояснює можливість автофокусування ендогенного електромагнітного поля в нелінійному оптичному середовищі, яким являється середовище, утворенне з'єднувальними біологічними тканинами та міжклітинною водою в біосистемах. Пояснено динамічний характер такого автофокусованого електромагнітного поля, що залежить від фізичних параметрів систе-

ми, а отже, від фізіологічного стану організму, та можливість впливу на нього зовнішніми полями резонансних частот [Larissa Brizhik, Enrico Chiappini, Patrizia Stefanini, and Giuseppe Vitiello. Modeling meridians within the Quantum Field Theory. JAMS, 2018, 37. DOI: 10.1016/j/jams2018.06.009; L. Brizhik, Role of electromagnetic field in self-organisation of living matter: from cells to ecosystems. Ecological Modeling, 2017, 368, 231–239] *(Л.С. Брижик, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).*

Досліджено вплив зовнішнього магнітного поля на динаміку солітонів та зумовлені ними процеси перенесення зарядів в окислювально-відновлювальних процесах в біологічних системах, на основі чого розвинуто теорію, що пояснює певні біофізичні аспекти проблем, пов'язаних зі здоров'ям та хворобами. Запропоновано механізм терапевтичної дії слабких низькочастотних магнітних полів [L. Brizhik, A. Foletti. Nonlinearity, coherence and complexity: biophysical aspects related to health and disease. Electromagnetic Biology and Medicine, 36(4) 315324 (2017). doi: 10.1080/15368378.2017.1371034; L. Brizhik, Biological effects of pulsating magnetic fields: role of solitons. J. Adv. Phys., 2016, 76–82; http://arxiv.org/abs/1411.6576; L. Brizhik, L. Ferroni, C. Gardin, E. Fermi. On the Mechanisms of Wound Healing by Magnetic Therapy: the Working Principle of Therapeutic Magnetic Resonance. Int. J. Biophys, 2016, 6 (3), pp. 27–43; DOI: 10.5923/j.biophysics.20160603.01] *(Л.С. Брижик, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).*

Побудовано модель силових полів для молекули куркуміну та досліджено її конформаційні властивості у вакуумі та воді. Отримані значення для дипольного моменту добре узгоджуються з експериментальними даними. Знайдено, що присутність води змінює конформацію молекули куркуміну на більш вигнуту, отримано фунції розподілу атом-атом та розраховано статистику водневих зв’язків між атомами куркуміну та води [J. Ilnytskyi, T. Patsahan, O. Pizio, On the properties of the curcumin molecule in water. Exploration of the OPLS – United atom model by molecular dynamics computer simulation, Journal of Molecular Liquids, Vol. 223, pp. 707–715 (2016), DOI: 10.1016/j.molliq.2016.08.098] *(Я. Ільницький, Т. Пацаган, ІФКС НАН України, О. Пізіо, Інститут хімії, УНАМ, Мехіко, Мексика).*

Досліджено кінетику та механічний стрес в азобензиновмісних матеріалах під впливом опромінення. Комбінація експериментальних даних щодо властивостей типових аморфних азополімерів із теоретичними підходами щодо стресу в системі жорстких ротаторів доводить можливість формування в таких матеріалах стресів порядку декілька ГПа під впливом опромінення. Саме такі оцінки для стресу випливають з експериментальних даних із деформації та подальшого розриву шару графену на поверхні азозополімеру. Теоретичні

розрахунки узгоджуються з отриманими результатами мезоскопічних комп'ютерних симуляцій [V. Toshchevikov, J. Ilnytskyi, M. Saphiannikova, Photoisomerization Kinetics and Mechanical Stress in Azobenzene-Containing Materials, Journal of Physical Chemistry Letters, Vol. 8, Iss.5, pp: 1094–1098 (2017), DOI: 10.1021/acs.jpclett.7b00173] *(Я. Ільницький, ІФКС НАН України, М. Саф'яннікова, В. Тощевиков, Ляйбніц-інститут полімерних досліджень, Дрезден, Німеччина).*

За допомогою методів спектроскопії низькотемпературної матричної ізоляції та квантово-механічних розрахунків вперше проведено аналіз коливних спектрів протиракового препарату 5-фторурацилу. Вперше отримано ІЧ-Фур'є спектри плівок 5-фторурацилу на підкладках з оксидом графену при кімнатній температурі та 6 К. Продемонстровано, що низькі температури не мають суттєвого впливу на спектральні характеристики плівок GO, а багаторазове термоциклювання не порушує цілісності плівок оксиду графену. Отримані результати мають практичне значення для спрямованої та ефективної доставки 5-фторурацилу в клітини при використанні оксиду графену як нанорозмірної платформи *(О.Ю. Іванов, В.О. Карачевцев, Ю.В. Рубін, Л.Ф. Білоус, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України).*

Встановлено вплив позитивного зарядового стану протонованих азотних основ цитозину та аденіну на структурні, енергетичні та електронні параметри їх взаємодії з вуглецевими нанотрубками. Вперше показано, що енергія взаємодії протонованих азотних основ ДНК цитозину та аденіну з вуглецевими нанотрубками майже втричі перевищує таку ж для нейтральних основ, а позитивний потенціал заряджених основ розповсюджується на примикаючий фрагмент нанотрубки. Результат має практичне значення для керування стабільністю та електронними параметрами нанокомпозитів нанотрубок із нуклеїновими кислотами шляхом зміни зарядового стану останніх *(М.В. Косевич, В.Г. Зобніна, С.Г. Степаньян, В.О. Карачевцев, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України).*

Показано можливість упорядкування окремих одностінних вуглецевих нанотрубок у желатиновій плівці при її розтягуванні. Виявлено кутову залежність поляризаційних спектрів поглинання світла та раманівських спектрів розсіювання желатинової плівки з наногібридами нанотрубок: ДНК, яка зумовлена значною відмінністю в поляризованості нанотрубок для світла, поляризованого вздовж і перпендикулярно до осі нанотрубки. За допомогою поляризаційних спектральних досліджень встановлено ступінь (~62%) упорядкування нанотрубок вздовж напрямку натягу. Впорядковані на поверхні вуглецеві одностінні нанотрубки використовуються в електроніці *(О.Ю. Гламазда, В.О. Карачевцев, О.М. Плохотніченко, В.С. Леонтьєв, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України).*

Проведено комплексне дослідження нанобіокомплексів, сформованих у полярних середовищах лікарським препаратом артемізинінового ряду, аскорбіновою кислотою та молекулами мембранних фосфоліпідів, методами мас-спектрометрії та квантово-механічних розрахунків. Ці дослідження слід віднести до тих, які модулюють живі системи і які показують конкуренцію цих препаратів за зв'язування з мембранними структурами. Отримані дані мають важливе практичне значення, бо свідчать про можливість модуляції біологічної дії протималярійних засобів артемізинінового ряду та аскорбінової кислоти при їх одночасному застосуванні в медичній практиці *(В.А. Пашинська, С.Г. Степаньян, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України).*

Досліджено типи зв'язування з ДНК і РНК водорозчинних порфіринових сполук, які можуть бути використані в медичних цілях. Вперше виявлено суттєві зміни абсорбційних і флуоресцентних характеристик катіонного порфірину TMPyP4 при зв'язуванні з полінуклеотидом (poly(rA)), які свідчать про їх сильну взаємодію внаслідок часткової інтеркаляції порфіринового хромофору поміж аденінових основ цього полімеру. Це спостереження вказує на можливість використання цієї сполуки для модифікації анти змістовних олігонуклеотидів у терапевтичних цілях. Виявлено підвищену ефективність генерації синглетного кисню катіонним феофорбідом-а (CatPheo-a) в порівнянні з аніонним Pheo-a при опроміненні світлом червоного діапазону, що свідчить про його підвищену фотодинамічну активність і дозволяє запропонувати цю сполуку для використання як фотосенсибілізатора для фотодинамічної терапії раку *(О.А. Рязанова, О.Ю. Гламазда, І.М. Волошин, В.О. Карачевцев, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України).*

Проведено моделювання зв'язування спайк-білка коронавірусу SARS-CoV-2 з імуностимулюючими лігандами природнього походження і противірусними препаратами. Для опису найбільш енергетично вигідних комплексів досліджених лігандів і молекули-мішені проведено моделювання з явним урахуванням іон-гідратного оточення. За оцінками вільної енергії зв'язування найкращий результат має комплекс з ледіпасвіром (–4.7±4.0 ккал/моль). Далі за цими критеріями йде потрійний комплекс нейтральної форми парітапревіру (–5.8±2.6 ккал/моль). У таких комплексах аментофлавон залишається в області зв'язування, тому його доцільно використовувати у комбінації з ліками проти гепатиту С, зокрема з ледіпасвіром та нейтральною формою парітапревіру, які характеризуються найкращою енергією зв'язування з рецептор-зв'язуючим доменом коронавірусу SARS-CoV-2 (*К.В. Мирошниченко, Г.В. Шестопалова, ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України*).

Запропоновано модель випадкової полімерної мережі, сформованої на основі випадкового графу Ердоша–Рені. Мовою математичних графів хімічні зв'язки між мономерами можна розглядати як вершини, а їх хімічні функціональності

– як їх ступінь вершини. Розглянено графи з числом вершин N = 5 і змінним параметром c (зв'язність) та загальною кількість зв'язків L = cN (N – 1) / 2 між вершинами. Кожен ланка на таких графах трактується як гауссовий полімерний ланцюг. Універсальні обертово-інваріанті характеристики розміру та форми, такі як усереднена асферичність та співвідношення розмірів таких мереж отримані як чисельно із застосуванням методу Вея, так і аналітично в межах модель безперервної ланцюга. Зокрема, наші результати кількісно вказують на збільшення асиметрії структури полімерної мережі, коли її зв'язність c зменшується [V. Blavatska, K. Haydukivska, Yu. Holovatch. Shape analysis of random polymer networks. *J. Phys.: Cond. Matt.* Vol. 32 (2020) 335102] *(В. Блавацька, Х. Гайдуківська, Ю. Головач, ІФКС НАН України).*

Проведено запис оптичної інформації у вигляді поляризаційних ґраток (голограм) з регульованою ефективністю дифракції на плівках світлочутливого азополімеру. Особливістю досліджуваних полімерів є поєднання азо- та азометинової груп у складі одного спряженого фрагмента основного полімерного ланцюга. Така архітектура визначає виключні механічні властивості полімерних плівок та їх високу термостійкість. Показано, що керування дифракційною ефективністю записаних в плівках Azo-Pam поляризаційних голограм можливе за рахунок зміни напрямку поляризації тестуючого променя. Отримані результати показують, що стратегія використання світлочутливих полімерів з азогрупою в основному ланцюзі є ефективним інструментом для розробки широкого спектру оптично активних матеріалів. Дослідження проводяться у співпраці з Інститутом хімії високомолекулярних сполук НАН України [Ya.L. Kobzar, I.M. Tkachenko, V.N. Bliznyuk, O.V. Shekera, T.M. Turiv, P.V. Soroka, V.G. Nazarenko & V.V. Shevchenko (2015): Synthesis and characterization of fluorinated poly(azomethine ether)s from new core-fluorinated azomethine-containing monomers, Designed Monomers and Polymers, DOI: 10.1080/15685551.2015.1092007. Volume 19, Issue 1, January 2016, pages 1–11; A. Kovalchuk, Y. Kobzar, I. Tkachenko, Y. Kurioz, O. Tereshchenko, O. Shekera, V. Nazarenko, V. Shevchenko, Photoactive Fluorinated Poly(azomethine) with Azo Groups in the Main Chain for Optical Storage Applications and Controlling Liquid Crystal Orientation, ACS Applied Polymer Materials 2, 455–463 (2020); I.M. Tkachenko, Yu.I. Kurioz, A.I. Kovalchuk, Ya.L. Kobzar, O.V. Shekera, O.G. Tereshchenko, V.G. Nazarenko & V.V. Shevchenko, Optical properties of azo-based poly(azomethine)s with aromatic fluorinated fragments, ether linkages and aliphatic units in the backbone, MCLC, 2020, v. 697, N. 1, 85–96] *(В. Назаренко, Ю. Курйоз, І. Ткаченко, В. Шевченко, Інститут фізики НАН України).*

Розроблено теорію синаптичної передачі (СП), або взагалі кажучи, теорію міжклітинної взаємодії з врахуванням наступної гіпотези і реальних процесів. Гіпотезу ізоморфізму застосовано для двох процесів: (а) кооперативної

поведінки медіаторів – молекул ацетилхоліну (ACh) та холінорецепторів (R), яка характеризується зв'язуванням ACh і R у медіатор-рецепторні комплекси (AChR), (б) критичної поведінки бінарної рідинної суміші, яка знаходиться в просторово обмеженому об'ємі поблизу критичної точки рідина-рідина (або критичного стану розшарування). Запропоновано системи двох (або трьох) нелінійних диференціальних рівнянь для визначення зміни концентрацій ACh, комплексів AChR і ацетилхолінестерази (AChE), що видаляє ACh з синаптичної щілини. Основні результати виконаного дослідження виявилися наступними: а) лінійний розмір зони активації знайдено як радіус кореляції для бінарної суміші медіатор-рецептор; б) процес активації постсинаптичної мембрани описано як кооперативний процес; в) досліджено різні апроксимації функції синхронного вивільнення ACh в синаптичну щілину; г) знайдено стаціонарні стани та типи особливих точок для запропонованих моделей СП; д) нелінійна кінетична модель СП з трьома параметрами порядку – концентраціями ACh, AChR і AChE продемонструвала поведінку дивного атрактора *(О.В. Чалий, О.В. Зайцева, НМУ ім. О.О. Богомольця, О.М. Васильєв, КНУ імені Тараса Шевченка).*

Створено електронний лабораторний онлайн практикум із медичної і біологічної фізики, який складається з 36 лабораторних і практичних занять. Висвітлено такі найважливіші теми дисципліни «Медична і біологічна фізика», як елементи молекулярної біофізики та біофізики мембранних процесів у клітинах, термодинамічні та синергетичні принципи біофізики складних систем, фізичні та біофізичні основи аудіометрії та ультразвукової діагностики, біомеханіки, біореології, гемодинаміки, електрокардіографії, фізіотерапії, оптичних, кванвовтово-механічних та інших методів, які використовуються в медицині. Електронний лабораторний онлайн практикум з медичної і біологічної фізики розроблений як українською, так і англійською мовами *(О.В. Зайцева, Д.В. Лукомський, О.М. Чайка, О.В. Чалий, НМУ ім. О.О. Богомольця).*

На кафедрі медичної і біологічної фізики та інформатики Національного медичного університету імені О.О. Богомольця виконано роботу за темою «Синергізм використання новітніх технологій та класичних методів викладання природничих дисциплін у вищій медичній школі України». Освітня система є синергетичною, тобто вона є відкритою, нелінійною, динамічною і складною системою. Значення синергетики для освіти і науки пов'язане з можливістю створення трансдисциплінарного діалогу, більш ефективного вивчення міжпредметних зв'язків, використанням цього міждисциплінарного напрямку для глибокого розуміння єдності законів природи і суспільства, а отже розвитку особистості як кінцевої мети всієї освітянської діяльності

(О.В. Чалий, К.О. Чалий, І.П. Кривенко. А.О. Криштопа, НМУ ім. О.О. Богомольця; О.В. Сисоєв, МЄУ; Б.Ф. Коваль, ВНМУ ім. М.І. Пирогова).

Розвинуто концепцію про залежність впливу катіонів металів на температури фазових переходів в модельних фосфоліпідних мембранах від їх валентності з відповідним істотним зростанням. Показано, що іони трьохвалентного церію в фосфоліпідній мембрані частково окислюються до чотирьохвалентного стану, що відбивається в зміні температур переходів у відповідно допованих модельних мембранах [O.V. Vashchenko, N.A. Kasian, L.V. Budianska, R.Ye. Brodskii, I.I. Bespalova, L.N. Lisetski. Adsorption of ions on model phospolipid membranes // J. Mol. Liq., 2019, V. 275, p. 173–177. DOI: 10.1016/j.molliq.2018.11.053] *(О.В. Ващенко, Н.О. Касян, Л.В. Будянська, І.І. Беспалова, Л.М. Лисецький, Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України).*

5. Комп'ютерне моделювання м'якої речовини

Впроваджено аналітичну модель потенціалу, що призводить до утворення рівноважних кластерів у рідкому стані. Процес утворення кластерів досліджено методом комп'ютерних симуляцій. Проаналізовано відмінності між кластерами в трьох відомих типах кластерних рідин *(А. Баумкетнер, ІФКС НАН України).*

Зміну пружних властивостей надкритичних плинів досліджено в області так званої «лінії Френкеля» на фазовій діаграмі плинів. Зокрема, проаналізовано теоретичні вирази для щілини поперечних колективних збуджень у довгохвильовій області, які отримуються в різних підходах. Використовуючи результати комп'ютерного моделювання методом молекулярної динаміки для надкритичних Ar та Ne, розраховано значення щілини з аналітичних виразів та напряму з форми спектральних функцій поперечного потоку. Показано, що одночастинковий «час Френкеля» не може визначати довгохвильову щілину для колективних зсувних хвиль. Проаналізовано густину станів поперечних пропагаторних мод та показано протиріччя підходу «лінії Френкеля» у розрахунку густини коливних станів та моделі Дебая для поперечної динаміки рідин *(Т. Брик, І. Мриглод, ІФКС НАН України).*

Методом моделювання першопринципної динаміки досліджено зміну атомарної структури, колективної та одночастинкової динаміки розплавів Pb та In вздовж кривої плавлення. З двопікової форми спектральних функцій поперечного потоку, розрахованих з отриманих в моделюванні поперечних часових кореляційних функцій, встановлено існування двох внесків у

спектральну функцію поперечного потоку при хвильових числах з другої севдозони Брілюена. Це підтверджує гіпотезу про зачіплення повздовжної та поперечної динаміки розплавів при високих тисках *(Т. Демчук, Т. Брик, ІФКС НАН України).*

Використовуючи метод дисипативної динаміки, модифікований для дослідження протікання плину, вивчено потік олігомерного плину через нано-канал із складною структурою. Отримано ефекти конформаційного випростування та орієнтаційного впорядкування олігомера вздовж потоку та профілі швидкостей мономерів, які виявляють неньютоновий характер потоку [J.M. Ilnytskyi, P. Bryk, A. Patrykiejew, Pressure-driven flow of oligomeric fluid in nano-channel with complex structure. A dissipative particle dynamics study, Condensed Matter Physics, Vol. 19, Issue: 1, Article No. 13609 (2016), DOI: 10.5488/CMP.19.13609] *(Я. Ільницький, ІФКС НАН України, П. Брик, А. Патрикеєв, Університет Марії Кюрі-Склодовської, Люблін, Польща).*

Здійснено комбінацію експериментальних та комп'ютерно-модельних досліджень стосовно можливості синтезу біосумісних мембран із регульованою пористістю. Досліджено властивості таких матеріалів, зокрема зміну пористості залежно від ступеня об'ємної адсорбції мембраною сумісного наповнювача та обговорено практичне застосування таких синтетичних мембран у біотехнологіях та промисловості [H. Kuroki, A. Gruzd, I. Tokarev, T. Patsahan, J. Ilnytskyi, K. Hinrichs, S. Minko, Biofouling-Resistant Porous Membranes with a Precisely Adjustable Pore Diameter via 3D Polymer Grafting, ACS applied materials & interfaces 11 (20), 18268–18275 (2019), DOI: 10.1021/acsami.9b06679] *(С. Мінько, Г. Курокі, А. Груздь, К. Гінріхс, Університет Джорджиї, Атени, США, Т. Пацаган, Я. Ільницький, ІФКС НАН України).*

За допомогою мезоскопічного моделювання досліджено характеристики форми полімерного ланцюга в доброму розчиннику. Моделювання дисипативної динаміки частинок проведено в тривимірному просторі в діапазоні довжин ланцюгів N . Показано, що при N > 10 характерний розмір лацюга описується законом скейлінгу, що дає досить точне значення для показника Флорі ν. В межах того самого інтервалу довжин ланцюгів виявляється, що асферичність, видовженість, співвідношення розмірів та інші характеристики форми ланцюга стають незалежними від N. Їх середні значення узгоджуються з відповідними теоретичними результатами та моделюванням методом Монте-Карло на гратці [O. Kalyuzhnyi, Ja. Ilnytskyi, Yu. Holovatch, C. von Ferber. Universal shape characteristics for the mesoscopic polymer chain via dissipative particle dynamics. *J. Phys.: Cond. Matt.* Vol. 28 (2016) 505101] *(О. Калюжний, Я. Ільницький, Ю. Головач, ІФКС НАН України, К. фон Фербер, Університет Ковентрі, Великобританія).*

За допомогою мезоскопічного моделювання проаналізовано характеристики форми зіркоподібних полімерних макромолекул у розчинниках різної якості. Моделювання динаміки дисипативних частинок виконується для однорідних та чотирьох різних гетерогенних полімерних зірок з однаковою молекулярною масою. Досліджено радіус радіації та асферичність в режимах поганого, доброго та θ-розчинника. Для пояснення збільшення асферичності в режимі θ-розчинника приведене обгрунтування, основане на взаємній грі між ентальпійним та ентропійним внесками у вільну енергію та аналізом асферичності окремих гілок [O. Kalyuzhnyi, J.M. Ilnytskyi, Yu.Holovatch, C. von Ferber. Universal shape characteristics for the mesoscopic star-shaped polymer via dissipative particle dynamics simulations. *J. Phys.: Cond. Matt.* Vol. 30 (2018) 215101] *(О. Калюжний, Я. Ільницький, Ю. Головач, ІФКС НАН України; К. фон Фербер, Університет Ковентрі, Великобританія).*

Довідкові матеріали

Монографії

B.I. Lev, A.G. Zagorodny. Applications of Field Theory Methods to Statistical Description Many-Body Systems. – World Scientific, Singapore, 2020.

Modern Problems of Molecular Liquids. – Edited by L. Bulavin, A.Chalyi. – Springer International Publishers, Switzerland, 2018.

Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory (Ed. by Yu. Holovatch). Vol. 5. – World Scientific Publishing, Singapore, 2018. – 399 p.

Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory (Ed. By Yu. Holovatch). Vol. 6. – World Scientific Publishing, Singapore, 2020. – 296 p. https://doi.org/10.1142/11711

О.В. Чалий, К.О. Чалий, Л.Г. Лесько, В.В. Пащенко, А.І. Єгоренков. Механізми та ефекти взаємодії фізичних полів з біологічними тканинами: фізичні основи фізіотерапії. – Київ: Видавництво «Книга-плюс», 2019. – 92 с.

Булавін Л.А., Куклін О.І., Носовський А.В., Соловйов Д.В. Нейтронні та рентгенівські дослідження ліпідних мембран. – Чорнобиль: Ін-т проблем безпеки атомних електростанцій НАН України, 2021. – 160 с.

Підручники

Медична і біологічна фізика. – Ред. О.В. Чалий. – Вінниця: Нова Книга, 2017. – 528 с.

Medical and Biological Physics. – Edited by A.Chalyi. – Vinnytsia: Nova Knyga, 2017. – 480 pp.

В.Г. Гурьянов, Ю.Є. Лях, В.Д. Парій, О.В. Короткий, О.В. Чалий, К.О. Чалий, Я.В. Цехмістер. Посібник з біостатистики. Аналіз результатів медичних досліджень у пакеті EZR (R-statistics). – Київ: Вістка, 2018. – 208 с.

Тематичні збірники

Обрії науки (збірка нарисів про науку і про вчених). – Ред.: Ю. Головач, Я. Грицак. – Львів: В-во Українського католицького ун-ту, 2016. – 186 с.

Оксана Вадимівна Пацаган. Бібліографічний покажчик. – Відп. ред.: І.М. Мриглод, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2016. – 32 с.

Михайло Васильович Токарчук. Біобібліографічний покажчик. – Відп. ред.: І.М. Мриглод, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2016. – 61 с.

Андрій Дмитрович Трохимчук. Біобібліографічний покажчик. – Відп. ред.: І.М. Мриглод, Т.М. Брик, О.Л. Іванків, Р.С. Мельник. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2016. – 47 с.

Юрій Васильович Головач. Бібліографічний покажчик. – Відп. ред.: І.М. Мриглод, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2017. – 68 с.

Ігор Васильович Стасюк. Бібліографічний покажчик. – Відп. ред.: І.М. Мриглод, А.М. Швайка, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2018. – 130 с.

Focus on Complexity. – Editors: S. Thurner, R. Kenna, Yu. Holovatch. – Eur. Journ. Phys. (2019). Focus on issue: https://iopscience.iop.org/journal/0143-0807/page/Focus-on-Complexity

Verba et numeri (кількісні підходи до аналізу мови й тексту). – Відп. ред.: Ю. Головач, А. Ровенчак (ред.). – Україна модерна, № 27 (2019) 152 с. http://dx.doi.org/10.30970/uam.2019.27

Інститут фізики конденсованих систем НАН України: дорога тривалістю в півстоліття. – Відп. ред.: І.М. Мриглод. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2019. – 392 с.

Обрії науки II. Історії часу. – Ред.: Ю. Головач, Я. Грицак, Б. Новосядлий. – Львів: В-во Українського католицького ун-ту, 2020. – 176 с., ISBN 978-617-7637-22-5.

Ігор Миронович Мриглод. Біобібліографічний покажчик. – Відп. ред.: Т.М. Брик, Ю.В. Головач, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2020. – 97 с.

Ігор Рафаїлович Юхновський. Біобібліографічний покажчик. – Відп. ред.: І.М. Мриглод, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2020. – 154 с.

Розділи в монографіях

J.M. Ilnytskyi, M. Saphiannikova, D. Neher, M.P. Allen, Computer Simulation of Side-Chain Liquid Crystal Polymer Melts and Elastomers, in Liquid Crystalline Polymers, Vol.1 – Structure and Chemistry (Eds. V. Kumar Thakur and M.R. Kessler), ISBN: 978-3-319-22893-8, eISBN: 978-3-319-22894-5, Springer Int. Publ., pp. 93–129 (2016), DOI: 10.1007/978-3-319-22894-5_4, https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-22894-5_4

J.M. Ilnytskyi, Photo-Controllable Networks in Macromolecular Solutions and Blends, in Order, Disorder and Criticality (Ed. Yu. Holovatch), vol. 5, World Scientific, pp. 227–269 (2018), DOI: 10.1142/9789813232105_0005, https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/9789813232105_0005

J. Ilnytskyi, Self-Assembly of Nanoparticles Decorated by Liquid Crystalline Groups: Computer Simulations, in Self-Assembly of Nanostructures and Patchy Nanoparticles (Ed. S. Mehraeen), IntechOpen, May 22nd 2020. Book data: DOI: 10.5772/intechopen.80196, ISBN: 978-1-78984-742-0, Print ISBN: 978-1-78923-960-7, eBook (PDF) ISBN: 978-1-78984-743-7, Chapter data: DOI: 10.5772/intechopen.89682 https://www.intechopen.com/books/self-assembly-of-nanostructures-and-patchy-nanoparticles/self-assembly-of-nanoparticles-decorated-by-liquid-crystalline-groups-computer-simulations

D.R. Evans, G. Cook, V.Yu. Reshetnyak, C.M. Liebig, S.A. Basun, P.P. Banerjee. Inorganic–Organic Photorefractive Hybrids, Chapter 6, Photorefractive Organic Materials and Applications. – Springer Series in Materials Science 240. – Springer, 2016. – P. 223–247.

Докторські дисертації

А.Б. Баумкетнер
Нові аспекти згортання та агрегації білків: теорія та комп'ютерне моделювання.
01.04.24 – фізика колоїдних систем, ІФКС НАН України, 2018.

О.В. Ващенко
Індивідуальна та спільна дія лікарських речовин в модельних ліпідних мембранах.
03.00.02 – біофізика, Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, 2020.

О.Ю. Гламазда
Низькорозмірні мультифункціональні кристалічні матеріали: вплив структурних особливостей на взаємодію між фононною, електронною та магнітною підсистемами.
01.04.07 – фізика твердого тіла, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України, 2020.

М.Л. Дудка
Критичні властивості магнетиків: вплив структурного безладу, анізотропії, фрустрацій.
01.04.02 – теоретична фізика, ІФКС НАН України, 2020.

Я.О. Ляшенко
Фазові переходи між кінетичними режимами граничного тертя.
01.04.07 – фізика твердого тіла, Сумський державний університет, 2017.

В.М. Махлайчук
В'язко-пружні та поляризаційні властивості систем зі сферичними та анізотропними молекулами в газовій та рідкій фазах.
01.04.02 – теоретична фізика, ОНУ імені І.І. Мечникова, 2020.

Т.М. Пацаган
Просторово обмежені плини: розвиток теоретичних підходів та комп'ютерне моделювання.
01.04.24 – фізика колоїдних систем, ІФКС НАН України, 2020.

С.Г. Степаньян
Молекулярна структура конформаційно лабільних біологічних сполук, ізольованих в низькотемпературних матрицях інертних газів.

01.04.14 – теплофізика та молекулярна фізика, ФТІНТ ім. Б.І. Вєркіна НАН України, 2018.

О.І. Якименко
Динаміка просторових структур в нелінійних середовищах.
01.04.02 – теоретична фізика, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, 2016.

Координаційна діяльність

Членство в Національній академії наук України

В.О. Карачевцев член-кореспондент Національної академії наук України за спеціальністю «експериментальна фізика біосистем» по Відділенню фізики і астрономії (обраний 2018 року)

Участь у роботі вітчизняних наукових рад, комітетів

Науковий комітет Національної ради України з питань розвитку науки і технологій (члени: Ю.В. Головач (2017–2019), Л.М. Лисецький (від 2017), Ю.В. Слюсаренко (від 2017))

Рада Державного фонду фундаментальних досліджень (члени (2016–2019): Л.А. Булавін, І.М. Мриглод)

Національне агентство із забезпечення якості вищої освіти (галузевий експерт (секція природничі науки): А.Д. Трохимчук)

Президія Національної академії наук України (президент НАН України: А.Г.Загородній (від 2020), радник: І.Р. Юхновський)

Комітет з Державних премій України в галузі науки і техніки (голова: А.Г. Загородній (від 2019), член секції фізики: О.С. Бакай, Л.А. Булавін, І.М. Мриглод, В.Й. Сугаков)

Наукова рада Міністерства освіти і науки України (член: Ю.В. Слюсаренко (від 2018))

Бюро Відділення фізики і астрономії НАН України (заст. академіка-секретаря: І.М.Мриглод)

Бюро Відділення ядерної фізики та ядерної енергетики (заст. академіка-секретаря: В.І. Слісенко, члени: Л.А. Булавін, Ю.В. Слюсаренко)

Бюро відділення біохімії, фізіології, і молекулярної біології (заст. академіка-секретаря: М.С. Веселовський)

Рада Західного наукового центру НАН та МОН України (заст. голови: І.М. Мриглод, керівник секції фізики та астрономії: Ю.В. Головач, члени виконкому: І.Р. Юхновський, І.В. Стасюк)

Координаційна рада НАН України з питань інформатизації (голова: А.Г. Загородній, член: І.М. Мриглод)

Наукове товариство імені Тараса Шевченка (члени Президії: І.М. Мриглод, І.В. Стасюк, заст. голови комісії фізики: Ю.В. Головач)

Наукова рада з проблеми «Фізика металічного стану» при Відділенні фізики і астрономії (член бюро: О.С. Бакай, члени ради: Л.А. Булавін, І.М. Мриглод, І.Р. Юхновський, Б.І. Лев, І.В. Стасюк, М.І. Лебовка):
Секція «Теорія металічних систем» (заст. голови: О.С. Бакай, члени: І.М. Мриглод, С.В. Пелетминський, І.Р. Юхновський, І.В. Стасюк, В.Й. Сугаков, Т.М. Брик)
Секція «Фізичні основи діагностики матеріалів» (члени: Л.А. Булавін, В.Л. Карбівський)
Секція «Наноструктуровані та аморфні матеріали» (члени: Б.І. Лев, М.І. Лебовка, В.Л. Карбівський, В.К. Носенко)
Секція «Фізика фазових і структурних перетворень» (член: В.К. Носенко)
Секція «Транспортні явища в металічних матеріалах» (член: І.В. Стасюк)

Наукова рада з проблеми «Фізика низьких температур і кріогенна техніка» при Відділенні фізики і астрономії (член бюро: Е.Я. Рудавський):
Секція «Фізика квантових рідин та кристалів» (голова: Е.Я. Рудавський, член: Ю.В. Слюсаренко)
Секція «Електронні властивості твердих тіл» (член: І.В. Стасюк)
Секція «Фізика молекулярних кристалів» (члени: Л.А. Булавін, В.Й. Сугаков, Ю.Ф. Забашта)

Координаційна рада цільової комплексної програми наукових досліджень НАН України «Грід-інфраструктура і грід-технології для наукових і науково-

прикладних застосувань» (голова: А.Г. Загородній, члени: О.І. Корнелюк, Т.М. Брик)

Експертна рада ДАК МОН з фізики і астрономії (члени: Е.Г. Петров, Т.М. Брик)

Бюро Відділення вищої освіти НАПН України (член: О.В. Чалий (до 2017))

Участь у роботі міжнародних наукових органів та структур

Л.С. Брижик – ад'юнкт-професор Технологічного інституту Вессекса (Великобританія), в.о. президента Міжнародного інституту фізики живого (Вєтоу, Німеччина, від 2019)

Т.М. Брик – член Міжнародного дорадчого комітету з проблеми «Рідкі і аморфні метали»

Л.А. Булавін – член програмно-консультативної ради з фізики конденсованих середовищ Об'єднаного інституту ядерних досліджень (Дубна)

Ю.В. Головач – представник від України у програмному комітеті Рамкової програми Європейського Союзу з досліджень та інновацій «Горизонт 2020» (2019–2020); член Дорадчої ради середньоєвропейської співпраці у галузі статистичної фізики (MECO); співкерівник Міжнародного коледжу докторантів «Статистична фізика складних систем» (Львів, Ляйпціг, Нансі, Ковентрі)

М.Ф. Головко – член наглядової ради Європейської та Японської груп з молекулярних рідин (EMLG/JMLG)

М.В. Косевич – представник України в Міжнародному мас-спектрометричному товаристві (International Mass Spectrometry Foundation)

Є.С. Крячко – радник Американського біографічного інституту; член Американського математичного товариства, Міжнародного товариства з квантової біології

Л.М. Лисецький – член Міжнародного рідкокристалічного товариства (International Liquid Crystal Society)

В.О. Мазур – член наукової ради Міжнародного центру з тепло- і масообміну (ICHMT – International Center for Heat and Mass Transfer)

І.М. Мриглод – член виконавчого комітету Боголюбівської програми ОІЯД-Україна з теоретичної фізики

В.Г. Назаренко – член програмного комітету і член ради директорів Товариства з інформаційних дисплеїв (Society for Information Display)

Е.Г. Петров– член Міжнародного товариства з молекулярної електроніки і біокомп'ютерів

В.Ю. Решетняк – член ради Міжнародного товариства з рідких кристалів (International Liquid Crystal Society), член Наукового дорадчого комітету з оптики рідких кристалів (Scientific Advisory Board of the Optics of Liquid Crystals), член Організаційного комітету з рідких кристалів для фотоніки (Organizing Committee Liquid Crystals for Photonics)

І.В. Стасюк – член міжнародного дорадчого комітету з проблеми «Домени в фероїках і мезоскопічні структури»

Членство у редколегіях журналів

Advances in Condensed Matter Physics (член редколегії: Ю.В. Головач)

Biopolymers & Cell (член редколегії: О.І. Корнелюк)

Condensed Matter Physics (головний редактор: І.Р. Юхновський, заст. головного редактора: Т.М. Брик, Ю.В. Головач, М.Ф. Головко, І.М. Мриглод, І.В. Стасюк, відповідальні секретарі: Я.М. Ільницький, О.В. Пацаган, члени редколегії: І.О. Вакарчук, А.Г. Загородній, Ю.В. Калюжний, М.П. Козловський, М.І. Лебовка, Ю.В. Слюсаренко, М.В. Токарчук)

East Europeann Journal of Physics (член редколегії: Ю.В. Слюсаренко)

Ecological Modeling (член редколегії: Л.С. Брижик)
https://www.journals.elsevier.com/ecological-modelling

European Journal of Physics (член редколегії: Ю.В. Головач)

Functional Materials (член редколегії: Л.М. Лисецький)

International Journal of Design & Nature and Ecodynamics (IJDNE) (https://www.witpress.com/journals/dne) (член редколегії: Л.С. Брижик)

Journal of Applied Nonlinear Dynamics (член редколегії: Ю.В. Головач)

Journal of Low Temperature Physics (член редколегії: Е.Я. Рудавський)

Mathematical Modeling and Computing (член редколегії: М.В. Токарчук)

OA Journal of Oncology (головний редактор: О.В. Чалий)

Open Physics (former Central European Journal of Physics) (редактор за напрямком Condensed Matter Physics: І.М. Мриглод, член редколегії: М.Ф. Головко)

Phase Transitions (член редколегії: І.В. Стасюк)

Progress in Theoretical Chemistry and Physics (член редколегії: Є.С. Крячко)

The International Journal of Quantum Chemistry (член редколегії: Є.С. Крячко)

Ukrainica Bioorganica Acta (член редколегії: О.І. Корнелюк)

Universal Journal of Materials Science (член редколегії: В.О. Карачевцев)

Біомедична інженерія та медична фізика (головний редактор: О.В. Чалий)

Біофізичний вісник (члени редколегії: В.О. Карачевцев, М.В. Косевич, В.Я. Малєєв, Г.В. Шестопалова)

Вісник Львівського університету. Серія фізична (відповідальний редактор: І.О. Вакарчук, член редколегії: С.І. Мудрий)

Вісник Національного університету «Львівська політехніка»: фіз.-мат. науки (член редколегії: І.М. Мриглод)

Доповіді Національної академії наук України (член редколегії: А.Г. Загородній)

Журнал фізичних досліджень (головний редактор: І.О. Вакарчук, члени редколегії: О.С. Бакай, Ю.В. Головач, І.В. Стасюк, О.В. Чалий)

Масс-спектрометрия (член редколегії: М.В. Косевич)

Медична інформатика і інженерія (член редколегії: О.І. Корнелюк)

Полімерний журнал (член редколегії: Ю.Ф. Забашта)

Радіофізика та електроніка (член редколегії: Г.В. Шестопалова)

Світ фізики (головний редактор: І.О. Вакарчук)

Український фізичний журнал (головний редактор: А.Г. Загородній, члени редколегії: Л.А. Булавін, М.П. Козловський, Е.Г. Петров, В.Й. Сугаков, П.М. Томчук, тематичний редактор: Б.І. Лев, Ю.В. Слюсаренко)

Фізика живого (члени редколегії: Л.С. Брижик, Л.А. Булавін, О.В. Чалий)

Фізика низьких температур (члени редколегії: О.С. Бакай, В.О. Карачевцев, члени консультативної ради: А.Г. Загородній, Е.Я. Рудавський)

Фізичний збірник НТШ (члени редколегії: Ю.В. Головач, І.М. Мриглод, І.В. Стасюк)

Хімія, фізика та технологія поверхні (член редколегії: М.І. Лебовка)

Ядерна фізика та енергетика (заст. головного редактора В.Й. Сугаков, члени редколегії: Л.А. Булавін, В.І. Слісенко)

Відзнаки: премії, нагороди

Премії

Державна премія України у галузі науки і техніки за 2016 рік за цикл робіт «**Енергоефективні світлодіодні освітлювальні системи»** (*В.М. Сорокін, А.В. Рибалочка, В.І. Корнага (ІФН ім. В.Є. Лашкарьова НАН України), З.Ю. Готра (НУ «Львівська політехніка»), В.Г. Мартіросова (ІМП НАМН України), І.І. Пастух (ТОВ «Екта-Пром»), В.В. Щиренко (ТОВ «ОСП корпорація Ватра»), Г.І. Нікітський (ТОВ «Світлодіодні технології»))*

Державна премія України у галузі науки і техніки за 2020 рік за цикл робіт «**Керування властивостями матеріалів в екстремальних умовах**» (Т.М. Брик, М.П. Козловський (ІФКС НАН України), О.С. Пелетминський (ННЦ ХФТІ НАН України), Ю.О. Плевачук (ЛНУ імені Івана Франка), О.Д. Рудь ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, В.М. Склярчук (ЛНУ імені Івана Франка), Ю.В. Слюсаренко, А.Г. Сотніков (ННЦ ХФТІ НАН України));

Державна премія України у галузі науки і техніки за 2020 рік за цикл робіт «**Інноваційні нанобіотехнології для ранньої діагностики і хіміотерапії патологічних станів**» (Р.С. Стойка (ІБК НАН України), А.В. Риндич, В.В. Філоненко (ІМБГ НАН України), Л.Б. Дробот, О.П. Матишевська (ІБ ім. О.В. Палладіна НАН України), Ю.І. Прилуцький (КНУ імені Тараса Шевченка), Р.Р. Панчук (ІБК НАН України), Я.В. Пірко (ІХБГ НАН України))

Премія НАН України імені О.І. Ахієзера (2019 р.) за цикл робіт «**Деякі проблеми фізики твердого тіла та квантової електродинаміки**» (В.Г. Бар'яхтар (ІМаг НАН України та МОН України), С.В. Пелетминський, М.Ф. Шульга (ННЦ ХФТІ НАН України));

Премія НАН України імені М.М. Боголюбова (2017 р.) за цикл робіт «**Асимптотичні методи нелінійної механіки та статистичної фізики**» (І.Р. Юхновський (ІФКС НАН України), М.О. Перестюк (КНУ імені Тараса Шевченка);

Премія НАН України імені Д.В. Волкова (2018 р.) за монографію «**Нейтронна діагностика рідкого стану речовини**» (Л.А. Булавін (КНУ імені Тараса Шевченка));

Премія НАН України імені О.С. Давидова (2017 р.) за цикл робіт «**Теорія деформованих моделей квантової механіки та їх застосування до опису фізичних систем**» (І.О. Вакарчук (ЛНУ імені Івана Франка), О.М. Гаврилик (ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України), В.М. Ткачук (ЛНУ імені Івана Франка))

Премія НАН України імені О.С. Давидова (2019 р.) за цикл робіт «**Розвиток статистичних методів дослідження структурно-невпорядкованих багаточастинкових систем**» (Ю.В. Головач, М.Ф. Головко (ІФКС НАН України), А.Г. Загородній (ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України))

Премія НАН України імені П.Г. Костюка (2017 р.) за цикл робіт «**Молекулярні та клітинні механізми активності функціональних**

нейронних мереж» (М.С. Веселовський, С.А. Федулова, М.С. Шипшина (Ін-т фізіології ім. О.О. Богомольця НАН України))

Премія НАН України імені В.Ю. Чаговця (2020 р.) за цикл робіт «**Механізми впливу норадреналіну на електричну активність нейронів ганглія трійчастого нерва**» (М.С. Веселовський, С.А. Федулова, М.В. Телька (Ін-т фізіології ім. О.О. Богомольця НАН України))

Державні нагороди

Л.С. Брижик: Почесна грамота Верховної Ради України (2016 р.)

А.Г. Загородній: Орден «За заслуги» II ст. (2016 р.)

І.М. Мриглод: Орден «За заслуги» III ст. (2020 р.)

Е.Г. Петров: Заслужений діяч науки і техніки України (2018 р.)

І.В. Стасюк: Орден «За заслуги» II ст. (2019 р.)

І.Р. Юхновський: Орден Свободи (2016 р.);
Відзнака Президента України – Ювілейна медаль «25 років незалежності України» (2016 р.);
Орден Князя Ярослава Мудрого III ст. (2020 р.);
Відзнака Верховної Ради України «30 років Декларації про державний суверенітет України» (2020 р.)

Відомчі та локальні відзнаки

А.Б. Баумкетнер: ювілейна почесна грамота (до 100-річчя НАН України) (2018)

Л.С. Брижик: почесна грамота НАН України (2017);
відзнака НАН України «За наукові досягнення» (2018)

Т.М. Брик: цінний подарунок Верховної Ради України (2018);
відзнака НАН України «За професійні здобутки» (2019)

Ю.В. Головач: ювілейна пам’ятна відзнака (до 100-річчя НАН України) (2018);
відзнака НАН України «За наукові досягнення» (2019);
член Львівської системи дослідників (2019);
почесний амбасадор Львова (2020)

М.Ф. Головко: відзнака НАН України «За наукові досягнення» (2018);
медаль НАПН України «Григорій Сковорода» (2018);
ювілейна пам’ятна відзнака (до 100-річчя НАН України) (2018)

М.Л. Дудка: ювілейна почесна грамота (до 100-річчя НАН України) (2018);
премія Львівської обласної ради відомим ученим і знаним фахівцям (2020)

Я.М. Ільницький: премія Львівської міської ради для талановитих вчених (2017);
ювілейна почесна грамота (до 100-річчя НАН України) (2018);
медаль Українського фізичного товариства за оригінальні наукові результати, одержані в галузі вивчення кінетики фотоізомеризації і часової еволюції впорядкування молекул в азобензиновмісних полімерних матеріалах (2018);
премія Львівської обласної ради відомим ученим і знаним фахівцям (2018, 2020)

Ю.В. Калюжний: ювілейна почесна грамота (до 100-річчя НАН України) (2018);
відзнака НАН України «За підготовку наукової зміни» (2019)

В.О. Карачевцев: ювілейна пам’ятна відзнака (до 100-річчя НАН України) (2018)

М.П. Козловський: ювілейна почесна грамота (до 100-річчя НАН України) (2018);
почесна грамота Президії НАН України (2019)

І.М. Мриглод: ювілейна пам’ятна відзнака (до 100-річчя НАН України) (2018);
відзнака Львівського міського голови «Золотий герб міста Львова» (2019);
подяка НАН України (2020)

О.В. Пацаган: ювілейна почесна грамота (до 100-річчя НАН України) (2018);
подяка НАН України (2019)

І.В. Стасюк: відзнака НАН України «За підготовку наукової зміни» (2018);
ювілейна пам'ятна відзнака (до 100-річчя НАН України) (2018)

М.В. Токарчук: відзнака НАН України «За підготовку наукової зміни» (2016);
ювілейна пам'ятна відзнака (до 100-річчя НАН України) (2018)

А.Д. Трохимчук: відзнака НАН України «За професійні здобутки» (2016);
ювілейна почесна грамота (до 100-річчя НАН України) (2018)

О.В. Чалий: нагрудний знак «Знак пошани» Київського міського голови (2016);
медаль НАПН України «Володимир Мономах» (2018);

І.Р. Юхновський: ювілейна пам'ятна відзнака (до 100-річчя НАН України) (2018);
медаль НАПН України «Володимир Мономах» (2018);
медаль НААН України «100 років НААН України» (2018);
подяка НАН України (2020)

Почесні доктори та члени товариств

І.Р. Юхновський: Doctor Honoris Causa Національного університету «Львівська політехніка» (2019 р.)

Проведення міжнародних та національних наукових конференцій

7th–9th International Conference «Physics of Liquid Matter: Modern Problems» (PLMMP-2016, 27–30 May, 2016; PLMMP-2018, 18–22 May, 2018; PLMMP-2020, 22–26 May, 2020), Kyiv (Л.А. Булавін, О.С. Бакай, М.Ф. Головко, А.Г. Загородній, М.П. Козловський, М.І. Лебовка, М.П. Маломуж, І.М. Мриглод, Ю.О. Плевачук, О.В. Чалий)

Давидовські читання з теоретичної фізики (Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, 26.12.2016; 26.12.2017; 27.12.2018; 26.12.2019) (А.Г. Загородній, Л.С. Брижик, Б.І. Лев)

7th–10th International Conference for Young Scientists «Low temperature physics» (ICYS–LTP–2016, 6–10 June 2016, ICYS–LTP–2017, 29 May – 2 June 2017, ICYS–LTP–2018, 4–8 June 2018, ICYS–LTP–2019, 3–7 June 2019), Kharkiv, Ukraine (В.Г. Зобніна, В.О. Карачевцев, Є.Л. Усенко)

Щорічні майстерні «Ising Lectures» (19th, May 17–19, 2016; 20th, June 14–16, 2017; 21st, May 7–9, 2018; 22nd, May 7–9, 2019)
http://www.icmp.lviv.ua/ising/about.html (Ю.В. Головач)

XVI–XX Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теоріх конденсованої речовини (9–10 червня 2016; 8–9 червня 2017; 7–8 червня 2018; 13–14 червня 2019; жовтня 2020), Львів, ІФКС НАН України

Робоча нарада з актуальних проблем фізики м'якої речовини (XI, 4 листопада 2016; XII, 16 листопада 2017; XIII, 2 листопада 2018; XIV, 31 жовтня 2019; XV, 6 листопада 2020) (М.Ф. Головко, І.М. Мриглод, А.Д. Трохимчук, Т.М. Брик)

Щомісячний семінар «Обрії науки» (2016–2020)
https://sites.google.com/view/seminar-horizons-of-science/home (Ю.В. Головач)

5-th, 6-th International Conference «NANOBIOPHYSICS: Fundamental and Applied Aspects», (October 2–5, 2017, Kharkiv; October 1–4, 2019, Kyiv, Ukraine) (В.О. Карачевцев, М.В. Косевич, Ю.В. Рубін, С.Г. Степаньян, О.В. Чалий та ін.)

Актуальні питання фізики конденсованих середовищ. Міжнародна конференція на відзначення сторіччя з дня народження професора А. Ю. Глаубермана, 13–16 листопада 2017 р., Одеса, Україна (В.М. Адамян)

Ulam Computer Simulation Workshop «Challenges & Opportunities in Molecular Simulations», June 21–24, 2017, Lviv, Ukraine (A.D. Trokhymchuk)

Конференція SIMS-Europe-2018, September 17–18, 2018, Munster, Germany (М.В. Косевич)

2-а Міждисциплінарна майстерня «Фізика і гуманітарні науки. Verba et numeri (кількісні підходи до аналізу мови і тексту)», 28 березня 2017, Львів (Ю.В. Головач)

Боголюбовська конференція «Проблеми теоретичної і математичної фізики», присвячена 110-річчю видатного фізика і математика М.М. Боголюбова, 24–

26 вересня 2019 р., Київ) (А.Г. Загородній, О.С. Бакай, Л.С. Брижик, Б.І. Лев, І.М. Мриглод, Е.Г. Петров, Ю.В. Слюсаренко, П.М. Томчук, І.Р. Юхновський)

The 5th Conference «Statistical Physics: Modern Trends & Applications», July 3–6, 2019, Lviv, Ukraine http://www.icmp.lviv.ua/statphys2019/index.html (I. Yukhnovskii, A. Bakai, T. Bryk, M. Holovko, O. Patsahan, I. Stasyuk, A. Zagorodny)

Робоча нарада «Рідини, низьковимірні системи та наноструктури, поверхневі явища», присвячений 100-річчю з дня народження професора Йосипа Залмановича Фішера, 20–21 червня 2019, Одеса, Україна

International Conference «International Advanced Study Conference on Condensed Matter & Low Temperature Physics 2020» (CM&LTP 2020), 8–14 June 2020, Kharkiv, Ukraine (В.О. Карачевцев).

Контактна інформація

Адамян Вадим Мовсесович
Одеський національний університет ім. І.І. Мечнікова,
кафедра теоретичної фізики та астрономії,
вул. Дворянська, 2, 65082, м. Одеса
E-mail: vadamyan@onu.edu.ua
Тел.: +380 48 7317556

Альохін Олександр Давидович
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет,
пр. Глушкова, 4, 03022, м. Київ
E-mail: alekhin@univ.kiev.ua

Антонов Віктор Миколайович
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142, м. Київ
E-mail: antonov@imp.kiev.ua
Тел.: +380 44 4243120, 067 8510821 (моб.)

Атамась Наталія Олексіївна
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики,
пр. академіка Глушкова, 2, корп. 1, 03022 м. Київ
E-mail: atamas@univ.kiev.ua
Тел.: +380 44 5262418

Бакай Олександр Степанович
ННЦ Харківський фізико-технічний інститут НАН України,
вул. Академічна, 1, 61108, м. Харків
E-mail: bakai@kipt.kharkov.ua
Тел./факс: +380 57 3356826

Баумкетнер Андрій Богданович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів
E-mail: andrij@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2701496

Блавацька Вікторія Богданівна
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів
E-mail: viktoria@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2707401

Брижик Лариса Свиридівна
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-б, 03143, м. Київ
E-mail: brizhik@bitp.kiev.ua
Тел./факс: 044 5213154 (роб), +380 66 786 05 30 (моб.)
https://sites.google.com/view/larissabrizhik

Брик Тарас Михайлович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: bryk@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2701496 / +380 32 2761158

Булавін Леонід Анатолійович
Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
Фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики,
просп. академіка Глушкова, 2, корп. 1, 03022 м. Київ
E-mail: bulavin@univ.kiev.ua, bulavin221@gmail.com
Тел./факс: +380 44 5262427

Веселовський Микола Сергійович
Інститут фізіології ім. О.О. Богомольця НАН України,
вул. Богомольця, 4, 01024, м. Київ
E-mail: nsvesel@biph.kiev.ua
Тел.: +380 44 2562423

Висоцький Володимир Іванович
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
Радіофізичний факультет,
вул. Володимирська 64, 01033, м. Київ
E-mail: viv@vhome.kiev.ua
Тел.: +380 44 4581832

Вільчинський Станіслав Йосипович
Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
Кафедра квантової теорії поля,
пр. Глушкова, 2, корп. 6, 03022, м. Київ
E-mail: sivil@univ.kiev.ua
Тел.: +380 44 5213386

Волков Сергій Наумович
Інститут теоретичної фізики імені М.М.Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна 14-б, 03143, м. Київ
E-mail: snvolkov@bitp.kiev.ua
Тел.: +380 44 5213459

Гаврюшенко Дмитро Анатолійович
Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
Фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики,
пр. академіка Глушкова, 2, корп. 1, 03022 м. Київ
E-mail: dmg@univ.kiev.ua
Тел.: +380 44 5262418

Гончар Микола Семенович
Інститут теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна 14-б, 03143, м. Київ
E-mail: mgonchar@bitp.kiev.ua
Тел.: +380 44 5213402

Головач Юрій Васильович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького 1, 79011, м. Львів
E-mail: hol@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2760908 / +380 32 2761158

Головко Мирослав Федорович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: holovko@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2760614 / +380 32 2761158

Гриценко Микола Іванович
Національний університет «Чернігівський колегіум» імені Т. Г. Шевченка,
природничо-математичний факультет, кафедра фізики та астрономії,
вул. Гетьмана Полуботка, 53, 14013 м. Чернігів
Тел.: +380 4622 34082

Держко Олег Володимирович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: derzhko@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2707439

Довбешко Галина Іванівна
Інститут фізики НАН України,
пр. Науки, 46, 03039, м. Київ
E-mail: gd@iop.kiev.ua

Дудка Максим Леонідович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: maxdudka@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2707401

Єсилевський Семен Олександрович
Інститут фізики НАН України,
пр. Науки, 46, 03039, м. Київ
E-mail: yesint4@gmail.com
Тел.: +380 44 5259851

Забашта Юрій Федосійович
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
Фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики,
пр. Глушкова, 2, корп. 1, 03022, м. Київ
Тел.: +380 44 5262418

Загородній Анатолій Глібович
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-б, 03143, м. Київ
E-mail: azagorodny@bitp.kiev.ua
Тел./факс: +380 44 5265362 / +380 44 5265998

Ільницький Ярослав Миколайович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: iln@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2761978 / +380 32 2761158

Калюжний Юрій Володимирович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: yukal@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2760614 / +380 32 2761158

Карачевцев Віктор Олексійович
Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України,
пр. Науки 47, 61103, м. Харків
E-mail: karachevtsev@ilt.kharkov.ua
Тел./факс: 057 3401595 (роб)

Карбівський Володимир Леонідович
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142, м. Київ
E-mail: karb@imp.kiev.ua
Тел.: +380 44 4242044, 067 8510821 (моб.)

Кисельов Олексій Доніславович
Інститут фізики НАН України,
пр. Науки, 46, 03028, м. Київ
Факс: +380 44 5251589

Клепко Валерій Володимирович
Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України,
Харківське шосе, 48, 02160, м. Київ
E-mail: klepko@ukrpack.net
Тел./факс: +380 44 5593711 / +380 44 2924064

Ковалевський Михайло Юрійович
ННЦ Харківський фізико-технічний інститут НАН України,
Інститут теоретичної фізики ім. О.І.Ахієзера
вул. Академічна, 1, 61108, м. Харків
Тел.: +380 57 3356270

Козловський Михайло Павлович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: mpk@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2760908 / +380 32 2761158

Корнелюк Олександр Іванович
Інститут молекулярної біології і генетики НАН України,
вул. Акад. Заболотного, 1450 03627, м. Київ
E-mail: kornelyuk@imbg.org.ua
Тел./факс: +380 44 5265589

Лебовка Микола Іванович
Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України,
бульв. Вернадського, 42, 03142, м. Київ
E-mail: lebovka@gmail.com
Тел./факс: +380 44 4240378

Лев Богдан Іванович
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна 14б, 03143, м. Київ
E-mail: bohdan.lev@gmail.com, blev@bitp.kiev.ua
Тел./факс: 044 5213163 (роб), 067 3042116 (моб)

Лисецький Лонгін Миколайович
Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України,
пр.Леніна, 60, 61001, м. Харків
E-mail: lisetski@isma.kharkov.ua
Тел./факс: 057 3410358 (роб), 050 0841336 (моб)

Ляшенко Яків Олександрович
Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2, 40007, м. Суми
E-mail: nabla04@ukr.net

Мазур Віктор Олександрович
Одеська національна академія харчових технологій,
Інститут холоду кріотехнології та екоенергетики,
кафедра термодинаміки та відновлювальної енергетики,
вул. Дворянська, 1/3, 65065, м. Одеса
E-mail: mazur@paco.net
Тел./факс: +380 48 7209169

Малєєв Володимир Якович
Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН України,
вул. Академіка Проскури, 12, 61085, м. Харків
E-mail: maleev@ire.kharkov.ua

Маломуж Микола Петрович
Одеський національний університет ім. І.І. Мечнікова,
кафедра теоретичної фізики та астрономії,
вул. Дворянська, 2, 65082, м. Одеса
E-mail: malomuzhnp@list.ru

Мартинов Євген Сергійович
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна 14б, 03143, м. Київ
E-mail: martynov@bitp.kiev.ua
Тел: +38 (044) 5213118

Микитюк Зіновій Матвійович
Національний університет «Львівська політехніка»,
вул. С. Бандери, 12, 79013, м. Львів
Тел.: +380 32 2582173

Мриглод Ігор Миронович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: mryglod@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2761978 / +380 32 2761158

Мудрий Степан Іванович
Львівський національний університет імені Івана Франка,
фізичний факультет, кафедра фізики металів,
вул. Кирила і Мефодія, 8, 79005, м. Львів
E-mail: stepanmudry@gmail.com
Тел./факс: 032 2394594 (роб)

Назаренко Василь Геннадійович
Інститут фізики НАН України,
пр. Науки, 46, 03039, м. Київ
E-mail: vnazaren@iop.kiev.ua
Тел./факс: +380 44 5251593

Настишин Юрій Адамович
Інститут фізичної оптики МОН України,
вул. Драгоманова, 23, 79005, м.Львів
Тел.: +380 32 2611483

Носенко Віктор Костянтинович
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36, 03680, м. Київ
E-mail: nosenko@imp.kiev.ua
Тел./факс: +380 44 4243505

Остапчук Юрій Леонідович
Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
Фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики,
пр. академіка Глушкова, 2, корп.1, 03022, м. Київ
Тел.: +380 44 5262418

Пацаган Оксана Вадимівна
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: oksana@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2760908 / +380 32 2761158

Пацаган Тарас Миколайович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: tarpa@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2760614 / +380 32 2761158

Пелетминський Сергій Володимирович
ННЦ Харківський фізико-технічний інститут НАН України,
вул. Академічна, 1, 61108, м. Харків
Тел.: +380 57 3356579

Пергаменщик Віктор Михайлович
Інститут фізики НАН України,
пр. Науки 46, 03039, м. Київ
E-mail: victorpergam@yahoo.com
Тел.: +380965213991 (моб.)

Петров Ельмар Григорович
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-Б, 03143, м. Київ
E-mail: epetrov@bitp.kiev.ua
Тел./факс: +380 44 5269881 / +380 44 5213441

Плевачук Юрій Олександрович
Львівський національний університет імені Івана Франка,
фізичний факультет, кафедра фізики металів,
вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, м. Львів
E-mail: plevachuk@mail.lviv.ua
Тел.: 067 2717594 (моб)

Погорелов Валерій Євгенович
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет, кафедра експериментальної фізики,
пр. академіка Глушкова, 4, 03022, м. Київ
E-mail: pvye@.ukr.net, pogorelov@mail.univ.kiev.ua
Тел./факс: +380 44 5264587

Решетняк Віктор Юрійович
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет, кафедра теоретичної фізики,
вул. Володимирська 64, 01601, м. Київ
E-mail: VReshetnyak@univ.kiev.ua
Тел./факс +380 44 5213574

Рудавський Едуард Якович
Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України,
пр.Леніна 47, 61103, м. Харків
E-mail: rudavskii@ilt.kharkov.ua
Тел./факс: +380 57 3403163 / +380 57 3403370

Слісенко Василь Іванович
Інститут ядерних досліджень НАН України,
пр. Науки, 47, 03028, м. Київ
E-mail: slisenko@kinr.kiev.ua
Тел./факс: +380 44 5255035

Слюсаренко Юрій Вікторович
ННЦ Харківський фізико-технічний інститут НАН України,
Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера
вул. Академічна, 1, 61108, м. Харків
E-mail: slusarenko@kipt.kharkov.ua
Тел.: +380 57 3356270

Соколов Святослав Сергійович
Фізико-технічний інститут низьких температур,
ім. Б.І. Вєркіна НАН України
пр. Науки 47, 61103, м. Харків
E-mail: sokolov@ilt.kharkov.ua
Тел./факс: 057 3403163 (роб)

Сорокін Віктор Михайлович
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова,
пр. Науки, 41, 03028, м. Київ
E-mail: vsorokin@isp.kiev.ua
Тел.: +380 44 5255785

Сотніков Андрій Геннадійович
ННЦ ХФТІ НАН України,
Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера
вул. Академічна, 1, 61108, м. Харків
E-mail: a_sotnikov@kipt.kharkov.ua
Тел. 057 335-65-79

Стойка Ростислав Стефанович
Інститут біології клітини НАН України,
вул. Драгоманова 14/16, 79005, м. Львів
E-mail: stoika@cellbiol.lviv.ua
Тел.: +380 32 2612287

Сугаков Володимир Йосипович
Інститут ядерних досліджень НАН України,
пр. Науки, 47, 03028, м. Київ
E-mail: sugakov@kinr.kiev.ua
Тел.: +380 44 5254810

Суходуб Леонід Федорович
Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2, 40007, м. Суми
E-mail: 1_sukhodub@yahoo.com, 1.sukhodub@med.sumdu.edu.ua
Тел.: +380 542 666005, 687734

Токарчук Михайло Васильович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: mtok@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2707401 / +380 32 2761158

Томчук Петро Михайлович
Інститут фізики НАН України,
пр. Науки 46, 03039, м. Київ
E-mail: ptomchuk@iop.kiev.ua
Тел.: +380 44 5250766

Трохимчук Андрій Дмитрович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м.Львів
E-mail: adt@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 032 2760614 / +380 032 2761158

Христофоров Леонід Миколайович
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-Б, 03143, м. Київ
E-mail: lchrist@bitp.kiev.ua

Чалий Олександр Васильович
Національний медичний університет ім. О.О. Богомольця,
Кафедра медичної та біологічної фізики,
бульв. Т. Шевченка, 13, 01160, м. Київ
E-mail: avchal@nmu.ua
Тел./факс: 044 4544921 (роб), 050 9624939 (моб)

Швайка Андрій Михайлович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: ashv@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 032 2761054 / +380 032 2761158

Шестопалова Анна Вікторівна
Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН України,
вул. академіка Проскури, 12, 61085, м. Харків
E-mail: shestop@ire.kharkov.ua
Тел./факс: +380 57 7203337 / +380 57 3152105 / 063 8333037 (моб)

Юхновський Ігор Рафаїлович
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свєнціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: yukhn@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 032 2761978 / +380 032 2761158