

Національна академія наук України
Відділення фізики і астрономії

**Наукова рада
з проблеми
«Фізика м'якої речовини»**

**Короткий підсумок діяльності
протягом 2021–2025 років**

Львів-Київ-2026

Наукова рада з проблеми «Фізика м'якої речовини». Короткий підсумок діяльності протягом 2021–2025 років. — Львів–Київ, 2026. — 249 с.

У книзі представлено вибрані результати робіт із фізики м'якої речовини, які проводилися протягом 2021–2025 років у наукових й освітніх установах України і координувалися діяльністю Наукової ради з проблеми «Фізика м'якої речовини» при Відділенні фізики і астрономії НАН України, а також вибрані довідкові матеріали.

Редакційна колегія

Мриглюд І.М. (відповідальний редактор), Брик Т.М., Булавін Л.А., Головач Ю.В., Головка М.Ф., Загородній А.Г., Іванків О.Л., Лев Б.І., Трохимчук А.Д.

В основі зображення на обкладинці — ілюстрація термоконтрольованої адсорбції та десорбції модельної клітини на мікроструктурованій полімерній щітці з адгезивною та термочутливою компонентами, отримана шляхом комп'ютерного моделювання (J. Ilnytskyi, D. Yaremchuk, and S. Minko. Interaction of colloidal particulates with dynamic microstructured polymer brushes: Computer simulations. — Langmuir, 2025, vol. 41, p. 12731–12744).

© Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України, 2026

Зміст

Зміст	3
1 Дослідження з фізики м'якої речовини в Україні: короткі підсумки 2021–2025 років	8
2 Персональний склад і структура Наукової ради з проблеми «Фізика м'якої речовини» при Відділенні фізики і астрономії НАН України	18
2.1 Загальна структура	18
2.2 Склад бюро	18
2.3 Склад секції статистичної фізики	19
2.4 Склад секції фізики рідкого стану	20
2.5 Склад секції рідких кристалів	21
2.6 Склад секції макромолекулярних та біологічних систем	22
2.7 Склад секції комп'ютерного моделювання м'якої речовини	23
2.8 Список установ, діяльність яких у галузі фізики м'якої речовини координується Науковою радою	24
3 Короткі наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини	26
3.1 Формування адсорбційних плівок в моделі випадкової послідовної адсорбції для сумішей частинок різної форми (М.І. Лебовка, М.В. Вигорницький)	26
3.2 Fundamental and applied aspects of medical and biological physics (A.V. Chalyi)	33
3.3 Фероелектричні нематичні рідинні кристали: нова парадигма для електрооптичних застосувань (В. Назаренко)	42
3.4 Моделювання структурних та динамічних властивостей ДНК з протийонами (С.М. Перепелиця)	52
3.5 Вплив топології складногалужених Гаусових макромолекул на їх поведінку в розчинах (В. Блавацька)	78
3.6 Фармакологічні особливості 4-тіазолідинонів як перспективних біологічно активних сполук (А.В. Лозинський, І.В. Коваленко, Р.Б. Лесик)	90

3.7	Застосування комп'ютерного моделювання адсорбції макромолекул на стимул-чутливих полімерних щітках до медико-біологічних задач (Я.М. Ільницький, О.Ю. Калюжний, Д.Л. Яремчук)	102
3.8	Окремі питання застосування прогностичних і генеративних моделей машинного навчання для біохімічного дизайну (М. Дручок)	121
4	Основні результати	137
4.1	Спонтанне формування структур у бінарних сумішах з конкуруючими взаємодіями (О.В. Пацаган)	137
4.2	Структура концентрованих електролітів: результати, отримані з мезоскопічної теорії (О.В. Пацаган)	138
4.3	Іонна рідина в ультратонкій плоскій порі (М. Дудка)	139
4.4	Загальний беззіткнений кінетичний підхід до вивчення збуджень у квантових атомних газах з довільним спіном (М. Булахов, О.С. Пелетминський, Ю.В. Слюсаренко)	140
4.5	Стан порушеної осьової симетрії та магнітна діаграма станів конденсату зі спіном 1 через призму квадрупольних ступенів вільності (М. Булахов, О.С. Пелетминський, Ю.В. Слюсаренко)	141
4.6	Посилення надпровідного спарювання в моделі Фермі-Габбарда за допомогою квантового контролю (О. Повігчан, Д.І. Бондар, А.Г. Сотніков)	142
4.7	Про «універсальну» теорію бозонного піка в аморфних матеріалах (А.М. Швайка, М.А. Шпот, Т.М. Брик)	143
4.8	Пропагаторна щілина для поперечних збуджень в бінарних рідинах (Т. Брик)	145
4.9	Моделювання поведінки та властивостей розчинів протеїнів і антитіл (Ю.В. Калюжний)	146
4.10	Дослідження властивостей плямистих колоїдів (Ю.В. Калюжний)	148
4.11	Статистичний підхід до опису процесів транспорту ліпопротеїнів та інших компонент у кровеносних судинах (М.В. Токарчук)	149
4.12	Проблеми води в НБК-ОУ. Теоретичний опис процесів взаємодії води, водних розчинів із паливовмісними матеріалами (М.В. Токарчук, О.Л. Іванків)	150

4.13	Динамічна дифрактометрія квазідвовимірних структур (В.В. Лізунов, О.С. Скакунова, С.В. Лізунова)	152
4.14	Вплив нанорозмірних домішок різної природи на структурно-чутливі властивості нанокompозитних сплавів на основі олова (Ю.О. Плевачук)	153
4.15	Перехід Фредерікса в фероелектричному нематичному рідинному кристалі (Н.С. Арясова, О.Г. Булуй, О.В. Курочкін, В.Г. Назаренко, Б. Баснет, С. Паладугу, С. Шияновський, О. Лаврентович)	157
4.16	Полярна самоорганізація фероелектричних нематичних рідиннокристалічних молекул на атомарно плоскій поверхні Au(111) (О. Марченко, А. Сененко, Я. Лопатіна, В. Назаренко, К. Назаренко, О. Капітанчук, Н. Катсоніс, О. Лаврентович)	158
4.17	Динаміка рідкокристалічних колоїдів (Б.І. Лев, О.М. Товкач, С.Б. Чернишук)	160
4.18	Динаміка рефрактивного індексу в моношарах Ленгмюра (Б.І. Лев, А.П. Ребеш)	161
4.19	Наноструктурування в нематичних рідкокристалічних системах (П.В. Ващенко, Л.М. Лисецький)	162
4.20	Модельні ліпідні мембрани як об'єкти молекулярної фізики: структурування під дією фармпрепаратів (Р.Є. Бродський, О.В. Ващенко)	163
4.21	Особливості агрегації ціанінових барвників у рідкокристалічному середовищі (О.М. Самойлов, С.С. Гранкіна, О.В. Сорокін, Л.М. Лисецький)	164
4.22	Рідкокристалічна щітка як орієнтуюча поверхня для рідких кристалів (Д. Яремчук, Т. Пацаган, Я. Ільницький)	166
4.23	Впорядкування рідкокристалічних наночастинок в об'ємі та розчиннику (А. Слюсарчук, Д. Яремчук, Ю. Лінтуворі, М.Р. Вілсон, М. Грензер, С. Соколовський, Я. Ільницький)	167
4.24	Магнетострикція еластомера в наближенні парних взаємодій (Д. Яремчук, Д. Іванейко, Я. Ільницький)	168
4.25	Нелінійна теорія транспорту зарядів у молекулярних донор-акцепторних системах (Л.С. Брижик)	169
4.26	Властивості форми асиметричних пом-пом полімерів у хорошому розчиннику (Х. Гайдуківська, О. Калюжний, В. Блавацька, Я. Ільницький)	171

4.27	Про властивості набухання пом-пом полімерів у розведених розчинах: симетричний випадок (Х. Гайдуківська, О. Калюжний, В. Блавацька, Я. Ільницький)	172
4.28	Про форму Гаусових безмасштабних полімерних мереж (В. Блавацька, Ю. Головач)	173
4.29	Коагуляційно-флокуляційні процеси на ґратках: моделювання методом Монте-Карло (В. Блавацька, Я. Ільницький, Е. Лахдеранта)	174
4.30	Характеристики розміру та форми полімерів топології «сніжинка» в хороших розчинниках (К. Гайдуківська, В. Блавацька, Я. Патурей)	175
4.31	Виживання в двовидовій реакційно-супердифузивній системі: ренормгруповий підхід та числове моделювання (Д. Шаповал, В. Блавацька, М. Дудка)	176
4.32	Застосування підходів статистичної фізики до задач про еволюцію біологічних популяцій (В. Блавацька, Б. Вацлав)	177
4.33	Індивідуальна упередженість та флуктуації в колективному прийнятті рішень: від алгоритмів до гамільтоніанів (П. Сарканич, М. Красницька, Л. Гомез-Нава, Ю. Головач)	178
4.34	Закони скейлінгу в термічній денатурації ДНК (Ю. Головач, Ю. Гончар)	179
4.35	Наноконтейнери для цільової доставки лікарських препаратів (К.Г. Березняк, Є.В. Духопельников, Н.О. Гладковська, Ю.М. Близнюк)	180
4.36	Дослідження сорбційних властивостей наночастинок шаруватих подвійних гідроксидів Ni_2FeOH у водних суспензіях (К.Г. Березняк, Є.В. Духопельников, Н.О. Гладковська, Ю.М. Близнюк)	181
4.37	Дизайнерські цвітеріонні фосфоліпідні ліганди для метал-галогенідних колоїдних наночастинок (А. Баумкетнер)	182
4.38	Багатоцільова <i>in silico</i> оптимізація біоактивних сполук за допомогою пошуку по дереву рішень методом Монте-Карло (М. Дручок, А. Ровенчак)	184
4.39	Новий метод встановлення адіабатичної швидкості звуку в рідинах з першопринципного комп'ютерного моделювання (Т. Брик)	184

4.40	Розвиток інфраструктури: розрахунковий кластер ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України (Т.М. Брик, Т.М. Пацаган)	186
5	Анотації вибраних результатів наукових досліджень	188
5.1	Статистична фізика	188
5.2	Фізика рідкого стану	194
5.3	Рідкі кристали	198
5.4	Макромолекулярні та біологічні системи	202
5.5	Комп'ютерне моделювання м'якої речовини	216
6	Довідкові матеріали	221
6.1	Монографії	221
6.2	Підручники	221
6.3	Тематичні збірники	222
6.4	Розділи в монографіях	222
6.5	Докторські дисертації	222
6.6	Членство в Національній академії наук України	223
6.7	Участь у роботі вітчизняних наукових рад і комітетів	224
6.8	Участь у роботі міжнародних наукових органів та структур	226
6.9	Членство у редколегіях журналів	227
6.10	Відзнаки: премії та нагороди	229
6.11	Проведення міжнародних та національних конференцій	231
7	Контактна інформація	234

1 Дослідження з фізики м'якої речовини в Україні: короткі підсумки 2021–2025 років

Цей короткий часовий проміжок в історії України однозначно буде вписаний як важкий і героїчний водночас. Пандемія COVID-19 у світі. Початок масової вакцинації у 2021 та поява нових штамів вірусу. Встановлення і посилення карантинних норм, які, зокрема, призвели до широкої практики віддаленої праці у багатьох наукових та освітніх установах. Проте попереду було нове і ще жакливіше випробовування – війна! 22 лютого 2022 року розпочалася неприхована агресія східного сусіда в Україну з гаслами про «денаціоналізацію» України, які фактично розуміються загарбником як знищення України як держави, а українців як нації. Свідоме і системне руйнування цивільної інфраструктури та вбивства мирного населення в обстрілах та бомбардуваннях як засіб впливу на населення з боку кровожерливого агресора. Значні руйнування дослідницької інфраструктури і суспільна зміна пріоритетів, коли основним стають завдання вижити і перемогти. Значні демографічні зміни, спричинені війною як у загальноукраїнському вимірі, так і за основними видами діяльності та регіональним розподілом. Війна триває... Проте росте і впевненість у тому, що перемога стає ближчою і роль української науки в процесі наближення до перемоги та завдань повернення до нормального життя у найближчому майбутньому лише зростатиме. Майбутнього, в якому домінуватимуть загальнолюдські цінності та прагнення до свободи. У цьому вбачають своє виправдання сотні і тисячі науковців, які продовжують сьогодні працювати в Україні. Продовжують працювати завдяки славним Збройним силам України. Глибока повага і подяка нашим славним воїнам!

Оскільки мова йде про певний підсумок наукової роботи, то не можна не згадати і про деякі дати, що стосуються досліджень із фізики м'якої речовини. Постановою Президії НАН України № 143 від 31 травня 2000 року було створено Наукову раду з фізики рідкого стану, яка наприкінці 2004 року була реорганізована в Наукову раду з проблеми «Фізика м'якої речовини» при Відділенні фізики та астрономії НАН України. Інститут фізики конденсованих систем НАН України було визначено як базову установу, яка організує і супроводжує діяльність Ради. До 2024 року Раду очолював академік НАН України І.Р. Юхновський – визначний фізик, відомий політик та громадський діяч, один із засновників і творців сучасної Укра-

їни та автор пропозиції всеукраїнського референдуму про незалежність, який відбувся 1 грудня 1991 року і фактично відкрив шлях до міжнародного визнання України. Ігор Юхновський став організатором і був багатолітнім директором Інституту фізики конденсованих систем НАН України. 26 березня 2024 року академік І.Р. Юхновський відійшов у засвіти. 1 вересня 2025 року йому мало би виповнитися 100 років від дня народження. Восени 2024 року Львівська міська рада з ініціативи мера Львова А.І. Садового проголосила 2025 рік Роком Юхновського у Львові. Згодом до низки заходів, що були заплановані спільно з мерією Львова, долучилися ціла низка державних структур – від Верховної Ради України, Національної академії наук України, Наукового товариства імені Шевченка і до багатьох інших громадських та державних організацій. Таким чином, 2025 рік став особливим для багатьох науковців як Рік 100-ліття Юхновського та рік 25-річчя з часу створення Ради з проблеми «Фізика м'якої речовини», яку І.Р. Юхновський очолював 24 роки. У 2024 р. відбулися зміни у складі Ради (постанова Бюро ВФА від 24.11.2024, протокол № 9). Головою Ради призначено акад. НАН України І.М. Мриглода, заступниками – акад. НАН України Л.А. Булавіна, чл.-кор. НАН України М.Ф. Головка, секретарями – О.Л. Іванківа та А.Д. Трохимчука. До складу Ради входять такі секції: статистичної фізики (голова – чл.-кор. НАН України М.Ф. Головка, секретар – О.В. Пацаган); фізики рідкого стану (голова – акад. НАН України Л.А. Булавін, секретар – І.Ю. Дорошенко); рідких кристалів (голова – акад. НАН України Б.І. Лев, секретар – А.П. Ребеш); макромолекулярних та біологічних систем (голова – акад. НАН України Ю.В. Головач, секретар – П.В. Сарканич); комп'ютерного моделювання м'якої речовини (голова – чл.-кор. НАН України Т.М. Брик, секретар – Т.В. Демчук). До списку установ, діяльність яких у галузі фізики м'якої речовини координується Науковою радою, нині входять понад 20 інститутів НАН України, 11 вищих навчальних закладів МОН України та 3 установи з інших відомств.

Тепер коротко про власне м'яку речовину чи м'яку матерію. Поняття *м'яка матерія* включає в себе широкий клас матеріалів, які легко деформуються або змінюють свою структуру при дії слабких зовнішніх чинників, зокрема механічних напружень чи при передачі тепла. При цьому інтенсивність таких впливів за енергією є близькою до теплової енергії навколишнього середовища. Тобто на відміну від твердих матеріалів, таких як метали чи кераміка, м'яка речовина володіє певними специфічними властивостями (легка деформованість, термочутливість, зміна мезоструктури та ефекти самоорганізації), що є проміжними між характер-

ними властивостями плинів і кристалічних твердих тіл. До м'якої речовини відносять цілу низку об'єктів, таких як пластмаси і макромолекулярні системи (пластмаси, гума, білки та ДНК-структури), колоїди (фарби та барвники, молочні продукти тощо), гелі та піни, рідкокристалічні системи, гранульовані матеріали такі як пісок, біоматеріали і т.п. Тобто, м'яка матерія – це велика різноманітність матеріалів, які відомі з нашого повсякденного життя і охоплюють як неживу природу, так і біологічні системи. Звідси і широкий спектр їх потенційних застосувань у різних ділянках – від споживчих товарів у харчовій, косметичній, фармацевтичній промисловостях (від розробки нових текстур їжі і до систем доставки ліків) та медицині (зокрема гідрогелів для контактних лінз, тканинної інженерії та біосенсорів) і до електроніки (гнучкі дисплеї і окремі компоненти) та енергетики (застосування в сонячних батареях, акумуляторах та нано-генераторах для збору енергії). Слід, водночас, наголосити на тому, що ключовим моментом у визначенні «м'яка матерія» є не просто відмінність від твердотільних систем, які «тримають форму», а ті особливості, що виникають на рівні фізичного розуміння та опису основних механізмів прояву «м'якості» на концептуальному рівні. Хоча сам термін вжила вперше Мадлен Вейсьє (Madeleine Veysseyé) з групи П'єра-Жіля де Жена (Pierre-Gilles de Gennes) – Нобелівського лауреата з фізики 1991 року та іноземного члена НАН України з 1992 року приблизно в 1970 році як жартиливий вислів, що в значній мірі на протиставленні «м'який-твердий» і базувався. Популяризував цей термін уже в сучасному його розумінні власне професор де Жен, зокрема у своїй Нобелівській лекції, яка мала таку ж назву. У своїй лекції він акцентував увагу саме на низці тих концептуальних відмінностей м'якої матерії, які важливі для пояснення її особливостей. Власне його і вважають одним із засновників фізики м'якої матерії як нової міждисциплінарної ділянки фізики.

То ж у чому відмінності м'якої матерії? Як уже згадувалося, енергії міжчастинкової взаємодії (для прикладу, сили Ван дер Ваальса чи водневі зв'язки) у таких матеріалах є порівняльними за інтенсивністю з тепловою енергією, а отже: теплові коливання сильно впливають на їхню структуру та властивості, вони чутливі до слабких впливів ззовні (зовнішні поля, зміни температури, механічні напруження), суттєвою у них є роль ентропійних ефектів, що пов'язані із зміною числа доступних конфігурацій і які визначають у значній мірі їхню макроскопічну поведінку. Ентропійний чинник впливає на формування мезоскопічних структур у таких системах на нано- та мікрометрових масштабах. Саме ці надмолекулярні структури

(наприклад, полімерні ланцюги, колоїдні частинки, ліпідні бішари тощо) визначають низку спостережуваних ефектів. Найпростіший приклад – це прояв в'язкопружної поведінки, яка залежно від швидкості прикладання сили демонструє як пружну (типову для твердих тіл), так і в'язку (як у рідинах) реакцію на деформацію. За перший тип поведінки відповідають «кластери» частинок, які мають порівняно невеликий час життя і відображають ефекти ближнього порядку в густих плинах. Ентропійні ефекти лежать також в основі явищ самоорганізації, коли: складні структури виникають спонтанно (самоорганізуються) через пошук балансу між енергією (взаємодіями) та ентропією. У цьому ж контексті хотілося б також згадати поняття емерджентності (*emergence* – виникнення, поява), яке прийшло з теорії складних систем і характеризує виникнення у складній системі нових властивостей чи якостей, які не притаманні її окремим елементам і котрі виникають лише внаслідок їхньої взаємодії. Простіше кажучи, це принцип, за яким ціле є чимось більшим, ніж просто сума його частин. Зрозуміло, що це поняття цілком гармонійно поєднується з усім тим, що йшлося вище про м'яку матерію, а водночас дозволяє дивитися на ті об'єкти, які вписуються у термін м'яка речовина, навіть ширше, бо сюди можна обґрунтовано включати також ті системи, які традиційно до фізики не відносяться, але до опису яких можна застосовувати подібний математичний апарат. Мова йде про так звану екофізику, задачі про стійкість і захист мереж чи рух транспорту, а також багато інших споріднених проблем.

Звідси зрозуміло, що поняття м'якої речовини в розумінні де Жена має у собі великий евристичний потенціал, що стосується великого комплексу задач, які потребують не просто адаптації уже відомих методів і підходів для їх вивчення, але й розвитку принципово нових уявлень, методів і теорій. Звідси основа міждисциплінарності цього напрямку як за переліком об'єктів, так і засобів їх вивчення у намаганні виділити спільне і головне, що важливе для розуміння їхньої поведінки. У такому формулюванні знаходимо водночас і певне пояснення тому, що термін м'яка речовина не знайшов на початках широкої підтримки навіть у середовищі дослідників, проте з часом він завойовує все більше прихильників. Для прикладу, у Сполучених Штатах Америки досі домінує більш формальний термін «складні або ж комплексні плинні» (*complex fluids*) для означення подібних матеріалів, хоча поняття «м'яка матерія», яке фактично включає у себе більший перелік об'єктів дослідження, набуває поволі все ширшого поширення. В Україні через хороші та тривалі контакти з дослідника-

ми з багатьох центрів світу термін почав використовуватися з кінця 90-х і в значній мірі це пов'язане з його просуванням академіком І.Р. Юхновським та членом-кореспондентом М.Ф. Головком, які стояли біля витоків і організації роботи нашої Ради, яка де факто об'єднує зусилля дослідників із різних ділянок науки, що працюють у одному напрямку і намагаються побачити те, спільне, що властиве таким суттєво відмінним об'єктам.

Діяльність Наукової ради з проблеми «Фізика м'якої речовини» проводиться у таких основних напрямках:

- Експертна оцінка відомчих проєктів, участь в експертних оцінках на замовлення державних структур;
- Координація діяльності теоретичних та експериментальних груп через проведення робочих нарад і наукових семінарів, стимулювання міждисциплінарних і прикладних досліджень;
- Сприяння поширенню сучасних методів комп'ютерного моделювання рідин, рідкокристалічних, макромолекулярних, хімічно-активних і біологічних систем через доступ до обчислювальних кластерів та програмних пакетів;
- Залучення молоді до передових досліджень у галузі фізики м'якої речовини через проведення науково-популярних заходів, а також конференцій та семінарів для молодих вчених;
- Стимулювання міжнародної співпраці дослідницьких груп з України та з провідних наукових центрів світу.

У кожному з цих напрямків проводиться відповідна робота. Так впродовж останнього п'ятирічного періоду було проведено експертне оцінювання понад 10 проєктів НДР, що відносяться до відомчої тематики НАН України. Фахівці ради широко залучалися до експертного оцінювання проєктів НФДУ і працювали у складі багатьох конкурсних комітетів на державному рівні. Тривала системна робота з рецензування наукових публікацій, які подавалися як до наукових журналів в Україні, так і за її межами.

В ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України на щорічній основі проводилися Робочі наради з актуальних проблем фізики м'якої речовини, традиція яких була закладена у 2006 р., зокрема у звітний період було організовано і проведено:

- XVI Робочу нараду в рамках Загальноукраїнської конференції наукових дослідників (19–25 вересня 2021). Було організовано засідання двох наукових сесій «Динаміка та теплові властивості непорядкованих систем» (21 вересня, організатори – Т. Брик, О. Кривчикова) та «Актуальні проблеми фізики м'якої речовини» (22 вересня, організатори – М. Головка, Я. Льницький, А. Трохимчук) на яких було представлено 9 доповідей;
- XVII Робочу нараду (9 грудня 2022), на якій з доповідями виступили Юрій Калюжний (Львів), Сергій Перепелиця (Київ), Ганна Шестопалова (Харків), Андрій Сотніков (Харків), Орест Пізіо (Мехіко, Мексика), Андрій Стельмах (Цюрих, Швейцарія);
- XVIII Робочу нараду (3 листопада 2023), приурочену до 80-ліття чл.-кор. НАН України М.Ф. Головка. На ній виступили Тарас Пацаган (Львів), Сергій Перепелиця (Київ), Олександр Чалий (Київ), Андрій Баумкетнер (Львів), Віктор Пергаменщик (Київ–Варшава), Юрій Плевачук (Львів), Андрій Трохимчук (Львів), Василь Назаренко (Київ), Орест Пізіо (Мехіко, Мексика);
- XIX Робочу нараду (29 листопада 2024), на якій з доповідями виступили Юрій Головач (Львів), Максим Дручок (Львів), Микола Лебовка (Київ), Юрій Слюсаренко (Харків–Львів), Вікторія Блавацька (Львів), Сергій Шевченко (Харків);
- XX Робочу нараду (11–12 грудня 2025), приурочену до 100-ліття акад. НАН України І.Р. Юхновського. На ній виступили Ігор Мриглюд (Львів), Мирослав Головка (Львів), Олександр Чалий (Київ), Володимир Джаган (Київ), Андрій Баумкетнер (Львів), Орест Пізіо (Мехіко, Мексика), Андрій Трохимчук (Львів), Віктор Пергаменщик (Київ–Варшава), Юрій Решетняк (Київ–Лондон), Тарас Пацаган (Львів), Сергій Мінько (Ейтенз, США), Роман Лесик (Львів), Ярослав Льницький (Львів), Максим Дручок (Львів), Сергій Перепелиця (Київ), Христина Гайдуківська (Львів).

Ці наради стали випробувальним майданчиком для апробації та обміну останніми результатами, координації діяльності і обговорення нових напрямків співпраці. Такі регулярні зустрічі органічно доповнювалися конференціями міжнародного рівня, прикладами яких можуть слугувати традиційні конференції з актуальних проблем статистичної фізики у

Львові та фізики рідин у Києві. Обставини, про які йшлося на початку, внесли свої корективи і, на жаль, остання із серії Міжнародних конференцій «Фізика рідкої речовини: сучасні проблеми» (PLMMP-9) була проведена у Києві в 2020 році. До певної міри подібна ситуація складалася із конференціями з актуальних проблем статистичної фізики і теорії конденсованої речовини, проте після майже шестирічної перерви з 2019 року все ж вдалося організувати та провести 6-ту Міжнародну конференцію «Статистична фізика: теорія та комп'ютерне моделювання», яка стала доволі представницькою і проходила у Львові 27–29 серпня 2025 р. Водночас, у цей часовий період досить активно почали використовуватися ті можливості, які відкрили технології онлайн-зустрічей. Число таких зустрічей у різних форматах – від наукових семінарів і до невеликий нарад – суттєво зросло. Найпомітнішими серед них стали міжнародні конференції «Nanophysics meets computer simulations» (8 листопада 2024) та «Статистична фізика у Львові» (30 червня – 3 липня 2025, офіційний сателіт Міжнародної конференції StatPhys29), що проходили у Львові в ІФКС НАН України. Перша з них була присвячена використанню методів комп'ютерного моделювання в дослідженні електронних, структурних та динамічних властивостей наносистем і була організована у співпраці з Національним фондом досліджень України та Фондом Фольксваген. Ініціатором іншої виступив Королівський технологічний інститут (Стокгольм, Швеція) за підтримки Міжнародного союзу теоретичної та прикладної фізики (IUPAP). Конференція була організована зусиллями ІФКС НАН України та ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України.

Останні роки яскраво продемонстрували все зростаючу роль методів комп'ютерного моделювання – свого роду альтернативного і доповнюючого способу пізнання навколишнього світу – у дослідженнях об'єктів м'якої речовини. Стимулювалися такі роботи, з одного боку, швидким ростом можливостей використання відповідних ресурсів, а також бурхливим впровадженням принципово нових підходів, зокрема методів машинного навчання і утвердженням напрямку, який уже зайняв своє важливе місце у науковому пошуку і відомий нині як штучний інтелект. З іншого боку, значні успіхи в синтезі нових матеріалів, що мають значні перспективи різноманітних прикладних і технологічних застосувань, актуалізували дослідження їх властивостей. Можна навести чимало прикладів, деякі з яких згадані у цьому звіті, що демонструють успіхи українських науковців у такій діяльності. Причому стосується це не лише отриманих ними наукових результатів, але й розвитку відповідної інфраструктури,

що має особливо вагоме значення в умовах війни. Тут для прикладу можна згадати виконання інфраструктурного гранту НФДУ, який почав виконуватися в ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, основне завдання якого побудова нового високопродуктивного кластера для різноманітних дослідницьких потреб. Вже після завершення першого етапу проєкту такий кластер почав працювати і продемонстрував такі параметри, які дозволяють віднести його до списку найпотужніших в Україні.

Однією з найгостріших проблем сьогодення залишається потреба у поповненні дослідницьких центрів молодими кадрами. Загалом ця проблема стосується не лише України, але у нас вона має свою специфіку, яка обумовлена в значній мірі нашими особливостями, зокрема хронічною недооцінкою можливостей та ролі науки в сучасному суспільстві з боку органів державної влади. На фоні інших проблем, що важливі для становлення і утвердження державного суверенітету, не надто багато уваги впродовж десятиліть приділялося розвитку освіти та науки. Низький престиж праці вченого, проблеми в утвердженні стандартів якісної освіти і відсутність чіткого бачення ролі України у структурі майбутньої Європи і світу в цілому, призвели до того, що національна наука була поставлена в умови, коли головним пріоритетом дослідницьких установ ставало виживання. Очевидно, що в такій ситуації кожна із наукових спільнот намагалася діяти в такий спосіб, щоб хоча б частково виправити ситуацію. Зусилля Ради з проблеми «Фізика м'якої речовини» були спрямовані, з одного боку, на те, щоб зберегти інтерес до науки в тих, у кого він уже утвердився. Для цього організовувалися наукові зустрічі, де могли комунікувати молоді дослідники та досвідчені науковці зі своїми історіями успіху та новими ідеями. А з іншого боку, через активніше залучення молоді до великих проєктів як в Україні, так і за її межами. Перший напрям підтримувався через організацію різного роду майданчиків для обговорення наукових проблем – від окремих семінарів та конференцій молодих вчених і до участі молоді у міжнародних форумах. У роботі Ради чи не основним майданчиком для комунікації з молоддю стали щорічні Всеукраїнські школи-семінари молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, які розпочали свою роботу у 2001 році та регулярно проводяться в ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України. У звітний період були успішно організовані XXI–XXV школи-семінари, де брали участь молоді дослідники з усіх регіонів України. Детальніша інформація про програми цих шкіл доступна на сайті Інституту. Необхідно також зазначити, що у цьому напрямку активно працювала переважна більшість

академічних установ і вищих навчальних закладів України, представники яких входять до складу Наукової ради.

Важливе місце відводилося також заходам із заохочення молоді до участі в різноманітних програмах стажувань у дослідницьких центрах світу, що стосувалися як варіантів спільної з іноземними партнерами підготовки та навчання аспірантів (щонайменше два захисти в рамках спільної аспірантури у звітний період), так і їхнього залучення до участі в міжнародних і національних проєктах. І хоча певні обмеження наклали тут умови війни, все ж позитивних прикладів тут чимало, зокрема хотілося б тут особливо подякувати НФДУ, в рамках якого було профінансовано чимало програм, які передбачають залучення до проєктів молодих науковців. Через встановлення нових контактів виникали нові ідеї, що стимулювали подання нових проєктів, у тому числі в співпраці з партнерами з інших країн. Щоб не бути голослівним можна згадати тут цікавий проєкт українсько-швейцарської співпраці, який виник в результаті індивідуальних контактів і фінансується в рамках проєктів НФДУ (керівник з боку України А.Б. Баумкентер), у виконанні якого задіяно кілька молодих вчених з України. Інший приклад стосується програми міжнародної співпраці в рамках колаборації L4 (L4 Collaboration and Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems, Lviv–Leipzig–Lorraine–Coventry), де задіяні дослідницькі центри з чотирьох країн Європи і яка репрезентує доволі цікавий досвід взаємодії з партнерськими організаціями з інших держав. Чи можуть такі історії успіху вирішити проблему? Поза всяким сумнівом вони важливі та потрібні, бо дають хороші результати на локальному рівні та сприяють тому, що молоді дослідники залишаються в науці, однак важко сподіватися, що такі приклади зможуть змінити ситуацію на рівні держави без серйозних змін в масштабі України.

Тепер про найважче – наші втрати. У 2021–2025 роках відійшли у вічність видатні українські науковці, члени ради, які залишили по собі помітний слід в історії розвитку фізики в Україні:

Пелетмінський Сергій Володимирович (14.02.1931 – 18.01.2022) – провідний фахівець світового рівня у галузі статистичної фізики та її застосувань, академік НАН України, заслужений діяч науки і техніки.

Юхновський Ігор Рафаїлович (1.09.1925 – 26.03.2024) – відомий український фізик, громадський і політичний діяч, академік НАН України, народний депутат 1–4 скликань, почесний член НТШ, Герой України.

Томчук Петро Михайлович (2.01.1934 – 7.10.2024) – чудовий фізик-теоретик, член-кореспондент НАН України, заслужений діяч науки і техніки.

Мартинов Євген Сергійович (10.10.1948 – 2.08.2025) – знаний фізик-теоретик, один з найцитованіших українських вчених, доктор фізико-математичних наук, професор.

Бакай Олександр Степанович (16.09.1938 – 9.08.2025) – визначний фізик-теоретик, фахівець у галузі фізики конденсованих середовищ та ядерної матерії, академік НАН України, дійсний член НТШ.

Уже в час, коли почав готуватися цей звіт, прийшла інформація про смерть **Гриценка Миколи Івановича (8.03.1943 – 13.01.2026)**, відомого дослідника у галузі фізики органічних напівпровідників і фізики рідких кристалів, доктора фізико-математичних наук, професора. Праця наших колег житиме у справах їхніх учнів та колег. Вічна їм пам'ять!

На завершення хочу висловити щиру подяку усім колегам, які надіслали матеріали до цього Звіту, які містять короткі аналітичні огляди з окремих проблем, анотації основних результатів у ширшій та короткій формах, а також довідкові матеріали. Очевидно, що Звіт далекий до довершеності і повноти, але завдяки Вашим зусиллям він дозволяє скласти певну картину про те, чим жила фізика м'якої речовини в 2021–2025 роках в Україні. Висловлюю також щиру вдячність своїм колегам з Інституту, які зробили все належне, щоб надіслані матеріали були опубліковані у вигляді окремого видання.

Ігор Мриглод
березень 2026 року, місто Львів

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

2.1 Загальна структура

Голова: Мриглод І.М.

Заступники голови: Булавін Л.А., Головка М.Ф.

Секретарі: Іванків О.Л., Трохимчук А.Д.

Секції:

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

2.2 Склад бюро

Мриглод І.М.	акад. НАН України, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Булавін Л.А.	акад. НАН України, КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Головка М.Ф.	чл.-кор. НАН України, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Головач Ю.В.	акад. НАН України, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Загородній А.Г.	акад. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ

Лев Б.І.	акад. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Брик Т.М.	чл.-кор. НАН України, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Іванків О.Л.	к.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Трохимчук А.Д.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

2.3 Склад секції статистичної фізики

Головко М. Ф.	чл.-кор. НАН України, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів – голова
Пацаган О.В.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського 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 ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Слюсаренко Ю.В.	акад. НАН України, ІТФ ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
Сотніков А.Г.	чл.-кор. НАН України, ІТФ ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
Адамян В.М.	д.ф.-м.н., ОНУ імені І.І. Мечнікова, Одеса
Бистренко О.В.	д.ф.-м.н., ІПМ ім. І.М. Францевича НАН України
Гончар М.С.	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Держко О.В.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Дудка М.Л.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

2. Склад і структура Наукової ради

Засенко В.І.	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М.Боголюбова НАН України, Київ
Ковалевський М.Ю.	д.ф.-м.н., ІТФ ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
Момот А.І.	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка
Ткачук В.М.	д.ф.-м.н., ЛНУ імені Івана Франка, Львів
Токарчук М.В.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Швайка А.М.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

2.4 Склад секції фізики рідкого стану

Булавін Л.А.	акад. НАН України, КНУ імені Тараса Шевченка, Київ – голова
Дорошенко І.Ю.	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ – секретар
Слісенко В.І.	акад. НАН України, ІЯД НАН України, Київ
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
Гоцульський В.Я.	д.ф.-м.н., ОНУ імені І.І. Мечникова, Одеса
Калужний Ю.В.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Клепко В.В.	д.ф.-м.н., ІХВМС НАН України, Київ
Козловський М.П.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Кривчиков О.І.	д.ф.-м.н., ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків
Лазаренко М.М.	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Лебовка М.І.	д.ф.-м.н., Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України, Київ
Лізунов В.В.	д.ф.-м.н., ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ

Мазур В.О.	д.ф.-м.н., Одеський національний технологічний університет, 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
Трохимчук А.Д.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Трусова В.М.	д.ф.-м.н., ХНУ ім. В.Н. Каразіна НАН України, Харків
Чаговець В.К.	д.ф.-м.н., ФГПНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків
Чалий О.В.	д.ф.-м.н., НМУ ім. О.О. Богомольця МОЗ України, Київ
Ушкац М.В.	д.ф.-м.н., НУК ім. адм. Макарова, Миколаїв

2.5 Склад секції рідких кристалів

Лев Б.І.	акад. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ – голова
Ребеш А.П.	к.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ – секретар
Назаренко В.Г.	чл.-кор. НАН України, ІФ НАН України, Київ
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» імені Т.Г. Шевченка, Чернігів
Ільницький Я.М.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

2. Склад і структура Наукової ради

Капітанчук О.Л.	к.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Кисельов О.Д.	д.ф.-м.н., ІФ НАН України, Київ
Лисецький Л.М.	д.ф.-м.н., Інститут скінтіляційних 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
Погорелов В.Є.	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Решетняк В.Ю.	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Чернишук С.Б.	к.ф.-м.н., ІФ НАН України, Київ

2.6 Склад секції макромолекулярних та біологічних систем

Головач Ю.В.	акад. НАН України, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів – голова
Сарканич П.В.	к.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів – секретар
Бондар М.В.	акад. НАН України, Інститут фізики НАН України, Київ
Веселовський М.С.	акад. НАН України, Інститут фізіології ім. О.О. Богомольця НАН України, Київ
Карачевцев В.О.	чл.-кор. НАН України, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків
Корнелюк О.І.	чл.-кор. НАН України, ІМБГ НАН України, Київ
Петров Е.Г.	чл.-кор. НАН України, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Салига Ю.Т.	чл.-кор. НААН України, Інститут біології тварин НААН України, Львів
Стойка Р.С.	чл.-кор. НАН України, ІБК НАН України, Львів

2.7. Склад секції комп'ютерного моделювання м'якої речовини

Суходуб Л.Ф.	чл.-кор. НАН України, СДУ, Суми
Блавацька В.Б.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
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
Волков С.Н.	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
Перепелиця С.М.	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Христофоров Л.М.	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Шестопалова Г.В.	д.ф.-м.н., ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України, Харків

2.7 Склад секції комп'ютерного моделювання м'якої речовини

Брик Т.М.	чл.-кор. НАН України, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів – голова
Демчук Т.В.	к.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів – секретар
Антонов В.М.	чл.-кор. НАН України, ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ
Оковитий С.І.	чл.-кор. НАН України, ДНУ ім. О.Гончара, Дніпро
Атамась Н.О.	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Баумкетнер А.Б.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Єсилевський С.О.	д.ф.-м.н., ІФ НАН України, Київ

2. Склад і структура Наукової ради

Ляшенко Я.О.	д.ф.-м.н., СДУ, Суми
Мартинов Є.С.	д.ф.-м.н., ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
Ніколаєнко Т.Ю.	д.ф.-м.н., КНУ імені Тараса Шевченка, Київ
Пацаган Т.М.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Харченко В.О.	д.ф.-м.н., ІПФ НАН України, Суми
Шур Я.Й.	д.ф.-м.н., ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

2.8 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. Веркіна НАН України, Харків
- Інститут фізики конденсованих систем (ІФКС) імені І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- Інститут металофізики (ІМФ) ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ
- Інститут фізики напівпровідників (ІФН) імені В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ
- Інститут радіофізики та електроніки (ІРЕ) ім. О.Я. Усикова НАН України, Харків
- Радіоастрономічний інститут (РА) НАН України, Харків
- Інститут магнетизму (ІМаг) імені В.Г. Бар'яхтара НАН України, Київ
- Інститут математики (ІМ) НАН України, Київ
- Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» (ННЦ ХФТІ) НАН України, Харків
- Інститут ядерних досліджень (ІЯД) НАН України, Київ

- Інститут прикладної фізики (ІПФ) НАН України, Суми
- Інститут проблем безпеки атомних електростанцій (ІПБАЕ) НАН України, Чорнобиль–Київ
- Інститут проблем матеріалознавства (ІПМ) ім. І.М. Францевича НАН України, Київ
- Інститут монокристалів НАН України, Харків
- Інститут сцинтиляційних матеріалів (ІСМА) НАН України, Харків
- 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) імені І.І. Мечникова, Одеса
- Харківський національний університет (ХНУ) імені В.Н. Каразіна, Харків
- Дніпровський національний університет (ДНУ) імені Олеса Гончара, Дніпро
- Національний університет «Львівська політехніка» (НУ «ЛП»), Львів
- Сумський державний університет (СДУ), Суми
- Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова (НУК ім. адм. Макарова), Миколаїв
- Одеський національний технологічний університет (ОНТУ), Одеса
- Національний медичний університет імені О.О. Богомольця (НМУ ім. О.О. Богомольця) МОЗ України, Київ
- ДНП «Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького» МОЗ України, Львів
- Інститут біології тварин НААН України, Львів

3 Короткі наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

3.1 Формування адсорбційних плівок в моделі випадкової послідовної адсорбції для сумішей частинок різної форми

М.І. Лебовка, М.В. Вигорницький

Лабораторія фізичної хімії дисперсних мінералів,
Інститут біоколоїдної хімії імені Ф.Д. Овчаренка НАН України,
бульвар Академіка Вернадського, 03142 Київ, Україна,
e-mail: lebovka@gmail.com

3.1.1 Передмова

В останні роки велику увагу привертають моделі формування випадкових упаковок частинок на поверхні. Такі упаковки можуть використовуватися в електронних, оптичних, магнітних пристроях або як надійні еталонні системи для інтерпретації осадження білків та інших біочастинок. У зв'язку з цим дослідження механізму адсорбції є важливими з практичної точки зору. Комп'ютерне моделювання широко використовується для вивчення структурних та кінетичних аспектів осадження колоїдних частинок і макромолекул.

Для моделювання формування випадкових упаковок часто використовується модель випадкової послідовної адсорбції (RSA). Ця модель є однією з найпростіших, але нетривіальних процедур, яка враховує ефекти виключеного об'єму. В процесах RSA створюють конфігурації частинок, що нагадують моношари, отримані в незворотних процесах адсорбції. У RSA моделях частинки осаджуються послідовно одна за одну при відсутності перетинань. При досягненні концентрації насичення φ^f , або концентрації «джаммінгу» адсорбція припиняється. Величина φ^f відповідає максимально можливій частці площі поверхні, яку покривають частинки.

На протязі останніх п'яти років у лабораторії фізичної хімії дисперсних мінералів було досліджено поведінку моделі RSA для паличкоподі-

бних частинок (дископрямокутники), а також сумішей частинок різної форми (диски та дископрямокутники) [1–12].

У цьому короткому повідомленні будуть проілюстровані основні результати на прикладі [6]. Ця робота була присвячена вивченню структури адсорбційних плівок, що формуються в дво-стадійній моделі RSA для сумішей частинок, що мають форму дископрямокутників та дисків.

3.1.2 Дво-стадійна модель RSA для сумішей частинок, що мають форму дископрямокутників та дисків

В дво-стадійній моделі RSA на першій стадії створювалося попереднє покриття площини частинками одного типу (наприклад диски), а на другій стадії відбувалося осадження частинок іншого типу (наприклад дископрямокутники) [6].

На Рис.3.1.1 продемонстровані два варіанти осадження частинок. В SD моделі, спочатку осаджуються дископрямокутники до певного ступеня покриття площини φ_ε^p , а потім осаджуються диски до ступеня покриття, яке відповідає стану джаммінгу дисків φ_D^j . У моделі DS попередньо осаджуються диски до певного ступеня покриття φ_D^p , а потім осаджуються дископрямокутники до ступеня покриття, яке відповідає стану джаммінгу для дископрямокутників φ_ε^j . Для дископрямокутників використовується нижній індекс ε , а для дисків індекс D .

Усі розміри в моделі вимірювали з використанням значення товщини дископрямокутника d як одиниці вимірювання лінійних розмірів, діаметр дисків D варіювався в інтервалі значень 1–10, а величина аспектного відношення дископрямокутників ε змінювалася в інтервалі 1–50.

В моделях SD та DS значення коефіцієнта покриття φ для попередньо осаджених частинок задавалося чисельно, а для частинок другої черги коефіцієнт покриття φ^j обчислювався після досягнення стану джаммінгу. Проаналізуємо поведінку φ_D^j для SD моделі. Аналогічна поведінка величини φ_ε^j для DS моделі детально обговорюється в [6].

На рис. 3.1.2 наведено приклади поведінки джаммінг покриття φ_D^j для дисків. Тут наведено залежності φ_D^j від діаметра диска D при фіксованих значеннях φ_ε^p (а) та від концентрації дископрямокутників φ_ε^p при фіксованих значеннях D (б). Значення аспектного відношення дископрямокутника фіксовано $\varepsilon = 10$. Аналогічні залежності спостерігалися і для інших значень ε . Попереднє осадження дископрямокутників призводить до зменшення φ_D^j (рис. 3.1.2а). Наприклад, при $\varphi_\varepsilon^p = 0.05$ та $D = 1$ маємо

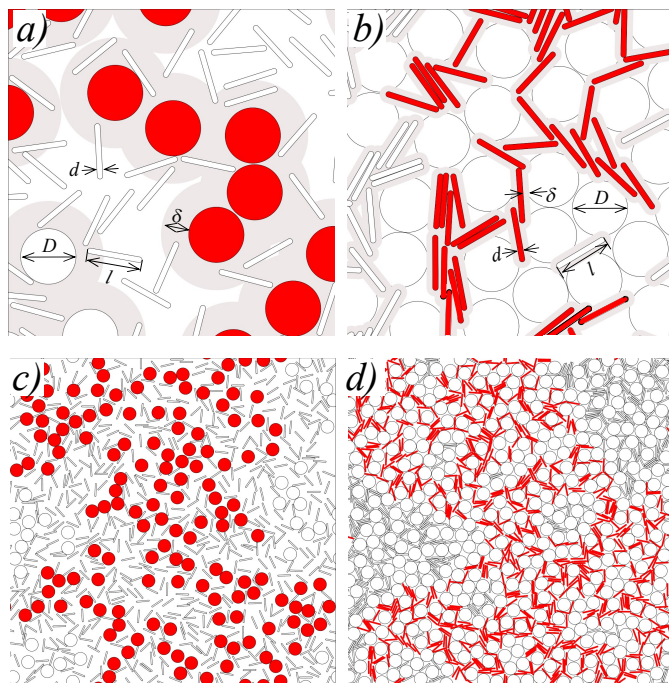


Рис. 3.1.1: Основні позначення для SD (a) та DS (b) моделей. Представлені зображення є збільшені вирізки розміром $64d \times 64d$. Тут l та d є довжина та товщина дископрямокутника (аспектне відношення дископрямокутника визначається як $\varepsilon = l/d$), D є діаметр диску. Для упаковок у стані джаммінгу виконувався аналіз зв'язності частинок, що осаджувалися на другій стадії (це диски для SD моделі та дископрямокутники для DS моделі). Вважалося, що частинки покриті м'якою оболонкою товщиною δ , і можуть утворювати контакти за рахунок перекриття м'яких оболонок, тобто формують перколяційну сітку. На рисунку частинки, які утворюють перколяційний кластер, зображені червоним кольором. Приклади перколяційних кластерів представлені для SD (c) та DS(d). Упаковки було побудовано при наступних значеннях параметрів: $\varepsilon = 10$, $\varphi_\varepsilon^p = 0.1$, $D = 2$, $\varphi_D^I = 0.448$, $\delta/d = 4.96$ (SD модель) і $D/d = 10$, $\varphi_D^p = 0.54$, $\varepsilon = 10$, $\varphi_\varepsilon^I = 0.160$, $\delta/d = 1.08$ (DS модель).

3.1. Формування адсорбційних плівок

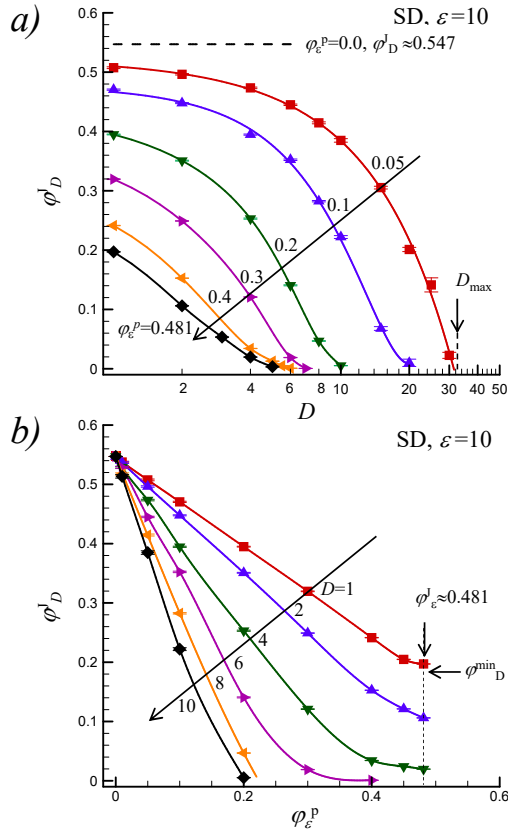


Рис. 3.1.2: Залежність джаммінг концентрації для дисків ϕ_D^J від діаметра D при різних концентраціях попередньо осаджених дископрямокутників ϕ_ε^P (a) та від величини ϕ_ε при різних величинах D (b). Дані представлені для SD моделі при фіксованому аспектному відношенні $\varepsilon = 10$. Величини $\phi_D^J \approx 0.547$ (a) та $\phi_\varepsilon^J \approx 0.481$ (b) є джаммінг концентрації для дисків та дископрямокутників, відповідно. Тут величина D_{\max} є граничний (максимальний) діаметр диска (a), а величина ϕ_D^{\min} відповідає мінімальному значенню ϕ_D^J при максимально можливому заповненні поверхні дископрямокутниками $\phi_\varepsilon^J \approx 0.481$ (b).

$\varphi_D^J = 0.508 \pm 0.002$, що помітно менше за значення джаммінгу для дисків $\varphi_D^J \approx 0.547$, які адсорбуються на чистій поверхні, тобто без попереднього осадження дископрямокутників. Значення φ_D^J зменшується зі збільшенням D (рис. 3.1.2a) та збільшенням φ_ε (рис. 3.1.2b).

Наявність перших осаджених частинок для обох моделей SD і DS регулює не тільки значення джаммінг концентрацій φ_D^J та φ_ε^J , а також впливає на максимально можливий діаметр диска D_{\max} (модель SD) або максимальне аспектне відношення ε_{\max} (модель DS). Таким чином, попереднє осадження частинок іншого сорту працює як своєрідний «адсорбційний фільтр» для частинок, що адсорбуються на другій стадії. В загальному випадку оцінити значення величин D_{\max} або ε_{\max} неможливо, але в частковому випадку, коли осадження частинок другої стадії відбувається після досягнення стану джаммінгу частинками першої стадії, ці величини задовольняють простим лінійним залежностям

$$D_{\max}^J = 1 + \alpha(\varepsilon - 1), \quad (3.1.1)$$

де $\alpha = 0.38 \pm 0.02$, і

$$\varepsilon_{\max}^J = \beta(D - 1), \quad (3.1.2)$$

де $\beta = 5.46 \pm 0.26$.

Верхній індекс J у формулах (3.1.1) і (3.1.2) ми використовуємо тут для того, щоб підкреслити що ці залежності виконуються лише для часткового випадку, коли адсорбція частинок на другій стадії відбувається при максимальному заповненні поверхні частинками першої стадії, тобто після досягнення стану джаммінгу. Така проста поведінка залежностей (3.1.1) і (3.1.2) пояснюється осадженням частинок на другому етапі в трикутні (модель SD) або витягнуті (модель DS) пори, утворені частинками, осадженими на першому етапі.

Бібліографія

1. N I Lebovka, L A Bulavin, V I Kovalchuk, M R Petryk, and N V Vygornitskii. Impact of ageing on structure of random sequential adsorption packings of discorectangles. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 57(33):335001, 2024.
2. N. I. Lebovka, M. R. Petryk, and N. V. Vygornitskii. Percolation connectivity in deposits obtained using competitive random sequential adsorption of binary disk mixtures. *Condensed Matter Physics*, 27(1):13201, 2024.

3. Nikolai Lebovka, Michal Cieila, Luca Petrone, and Nikolai Vygornitskii. Competitive random sequential adsorption of binary mixtures of disks and discorectangles. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 57(9):095001, 2024.
4. Nikolai Lebovka, Michal Ciesla, Mykhaylo Petryk, and Nikolai Vygornitskii. Cooperative sequential adsorption of monomers on a square lattice in the presence of repulsive interactions between near neighbors. *Phys. Rev. E*, 110:064801, 2024.
5. Nikolai Lebovka, Nabil Grimi, Eugene Vorobiev, and Nikolai V Vygornitskii. Simulation of membrane-assisted electroseparation of binary suspension. *Journal of Applied Physics*, 137(17), 2025.
6. Nikolai Lebovka, Mykhaylo Petryk, Mykhailo O. Tatochenko, and Nikolai V. Vygornitskii. Two-stage random sequential adsorption of discorectangles and disks on a two-dimensional surface. *Phys. Rev. E*, 108:024109, 2023.
7. Nikolai Lebovka, Mykhaylo Petryk, and Eugene Vorobiev. Monte-carlo simulation of dead-end diafiltration of bi-dispersed particle suspensions. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 106:064610(1–6), 2022.
8. Nikolai I. Lebovka, Michal, Ciesla, and Nikolai V. Vygornitskii. Sedimentation of a suspension of discorectangles. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 644:129837, 2024.
9. Nikolai I. Lebovka, Mykhailo O. Tatochenko, Nikolai V. Vygornitskii, Andrei V. Eserkepov, Renat K. Akhunzhanov, and Yuri Yu. Tarasevich. Connectedness percolation in the random sequential adsorption packings of elongated particles. *Phys. Rev. E*, 103:042113, 2021.
10. Nikolai I. Lebovka, Mykhailo O. Tatochenko, Nikolai V. Vygornitskii, and Yuri Yu. Tarasevich. Confinement effects on the random sequential adsorption packings of elongated particles in a slit. *Phys. Rev. E*, 104:054104, 2021.
11. Nikolai I. Lebovka, Mykhailo O. Tatochenko, Nikolai V. Vygornitskii, and Yuri Yu. Tarasevich. Relaxation of saturated random sequential adsorption packings of discorectangles aligned on a line. *Phys. Rev. E*, 104:064104, 2021.

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

12. Luca Petrone, Nikolai Lebovka, and Michal Ciesla. Random sequential adsorption of aligned rectangles with two discrete orientations: Finite-size scaling effects. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 103201:1–15, 2023.

3.2 Fundamental and applied aspects of medical and biological physics

Alexander V. Chalyi

Bogomolets National Medical University,
Department of Medical and Biological Physics and Informatics

3.2.1 Cell-to-cell communication and synaptic transmission in the brain

The problem of synaptic transmission and cell-to-cell communication is extremely important for understanding the functioning of the human brain [1–7]. Recent experimental studies of the mechanisms of synaptic transmission have established a significant role of the porocytosis hypothesis and synaptomers [4,5]. Using ultramicroscopic studies, it was found that synaptomers are hexagonal formations on the inner side of the presynaptic membrane, consisting of six vesicles. The sites of vesicles' attachment are located at the vertices of a regular hexagon in deepenings with a linear dimension about 10 nm. Under the influence of the action potential reaching the presynaptic membrane, calcium channels are activated causing a simultaneous contraction of all 6 vesicles for each synaptomer.

As for the model of generation and propagation of action potential, J. Eccles, A. Hodgkin, and A. Huxley received the 1963 Nobel Prize in Medicine or Physiology “for their discoveries concerning the ionic mechanisms involved in excitation and inhibition in the peripheric and central portions of the nerve cell membrane” [8].

It should also be noted that hexagonal structures play an important role in the brain's operation. In addition to the example of the manifestation of hexagons in the structure of synaptomers considered here, there is another phenomenon in the brain with the participation of hexagons in the process of spatial orientation of humans and animals. As is known, the 2014 Nobel Prize in Medicine or Physiology was awarded for the discoveries of the so-called “place cells” by J. O'Keefe in 1971 and “grid cells” by E.I. Moser and M.-B. Moser in 2005 [9]. Both types of cells have formed a positioning system in the brain, representing the spatial position, direction, and speed of movement. In particular, grid cells have multiple excitation regions creating a virtual 6-grid lattice with hexagon structures.

This section aims at overviewing the results of the application of physical methods in medicine, and at formulating new ideas and results which describe the processes occurring in biomedical systems. Special attention will be paid to considering the synergetic interdisciplinary analogies in the following systems on the border of physics and medicine: (a) grid cells in the brain (2014 Nobel Prize in physiology or medicine) and Benard cells in viscous fluids with a temperature gradient; (b) synaptic transmission (generally speaking, cell-to-cell communication) and its theoretical description based on models using nonlinear differential equations; (c) processes of nucleation in physics and carcinogenesis in medicine. The study of all these systems is unified by a general idea of creating the fluctuation models that take into account the coherent nature of the processes of ordering, self-organization and new phase formation. The proposed fluctuation models are based on such fundamental principles of the theory of phase transitions and critical phenomena as the Ginsburg-Landau Hamiltonian and its justification in the method of collective variables, the hypotheses of universality classes, scaling and conformal invariance, as well as the theoretical results obtained by Haken on hexagons in Benard cells [1–4].

The section has two additional objective goals. The implementation of the first goal uses three stages of studying natural phenomena described by Richard Feynman in his famous lectures as follows: 1st stage – the accumulation of experimental data; 2nd stage – the creating a theory that describes these experimental data; and finally, the 3rd (not so obvious) stage – formulation the main reason or “the first principle” underlying the theory which explains the experimental data. These stages are proposed to call “*The Feynman’s classification of the three stages of studying natural phenomena*”. The number of the first principles of nature (and society) must be much less than the number of laws. In other words, there is one more, perhaps the main first principle: “*Nature does not multiply its first principles*”. Another goal is to draw the attention of researchers (not only physicists, mathematicians, chemists, biologists, quantitative linguists and representatives of other so-called “exact or natural sciences”, but representatives of so-called “humanitarian specialties”) to the synergetic approach in their scientific and practical activities. In our opinion, synergetics turns out to be so effective due to transfer the numerical results of one science like physics (being a relatively “simple” science because of neglecting many inessential details) to the similar objects of a much more complex science like medicine. This transfer allows the researchers to gain a new level of understanding of the problem under study, which now acquires not only a qualitative, but also a quantitative character.

3.2.2 The porocytosis hypothesis versus the hypothesis of quantum-vesicular exocytosis

This section is devoted to the consideration of *the mechanism of porocytosis* with taking into account hexagonal formation – synaptomers, being a necessary modern component of the general problem of synaptic transmission and cell-to-cell communication. The number of synaptomeres N in the terminal bouton of a neuron near the presynaptic membrane is theoretically estimated: $N_{\text{theor}} \approx 221$. This theoretical estimate is in a good quantitative agreement with the experimental numerical value $N_{\text{exp}} \approx 200$ of synaptomeres adopted in the hypothesis of porocytosis [1].

The problem of synaptic transmission and cell-to-cell communication is extremely important for understanding the functioning of the human brain. Recent experimental studies of the mechanisms of synaptic transmission have established a significant role of *the porocytosis hypothesis* and *synaptomers* [5]. Using ultramicroscopic studies, it was found that synaptomers are hexagonal formations on the inner side of the presynaptic membrane, consisting of six vesicles. The sites of vesicles' attachment are located at the vertices of a regular hexagon in deepening with a linear dimension about 10 nm. Under the influence of the action potential reaching the presynaptic membrane, calcium channels are activated causing a simultaneous contraction of all 6 vesicles for each synaptomer.

As stated above, a number of experimental studies of the mechanisms of synaptic transmission has established an important role of *the porocytosis hypothesis* and so-called *synaptomers having a hexagonal geometry* [5]. The porocytosis hypothesis becomes an alternative to the previously existing hypothesis of quantum-vesicular exocytosis. According to the last hypothesis a distinctive feature of the mechanism of synaptic transmission is the complete release of mediator molecules into the synaptic cleft for uncorrelated vesicles in space, which merge with the presynaptic membrane. Processing the distribution of the amplitudes of postsynaptic potentials by methods of mathematical statistics showed that the theoretical value of the coefficient of variation (in other words, the mean value of the squared deviation of the amplitudes of postsynaptic potentials from their mean value, i.e. the mathematical expectation) is numerically consistent with the experimental data when using the porocytosis hypothesis. Using the hypothesis of quantum-vesicular exocytosis, the theoretical value of the coefficient of variation is almost 5 times higher than the experimental value of this coefficient.

Theoretical estimation of the number of synaptomers. Let us estimate the number of synaptomeres in the terminal bouton of a neuron near the presynaptic membrane [1]. For this numerical estimate, we use the following geometric parameters: (a) the diameter of each vesicle is approximately $d_v \approx (40-50) \text{ nm} \approx 45 \text{ nm}$; (b) the area of the maximum cross-section of the vesicle $A_v = \pi d_{vs}^2/4 \approx 1600 \text{ nm}^2$; (c) the radius R_S of the circle into which the hexagonal synaptomere is inscribed equals $R_S = d_v + r_v \approx 67.5 \text{ nm}$, with taking into account the approximation of close packing of all 6 vesicles of the synaptomere; (d) the area of the circle, into which all 6 vesicles of one synaptomere are inscribed, equals $A_S = \pi R_S^2 \approx 1.4 \cdot 10^4 \text{ nm}^2$; (e) the linear size (diameter) of the active zone of the neuron, we assume equal to $D_B \approx 2 \mu\text{m}$; (f) the surface area of the active zone of the terminal bouton $A_B = \pi D_B^2/4 \approx 3.1 \cdot 10^6 \text{ nm}^2$. As a final result, we obtain the following number N_S of synaptomeres in the active zone of the terminal bouton of a neuron: $N_S = A_B/A_S = 3.1 \cdot 10^6/1.4 \cdot 10^4 \approx 221$. Despite a number of significant approximations, the numerical value for the number $N_S \approx 221$ synaptomeres in the active zone of the axon terminal of a neuron shows a fairly satisfactory agreement with an accuracy of about 11 percent compared to the numerical value $N_S \approx 200$ of synaptomeres adopted in the hypothesis of porocytosis [5]. The result of the sequence of these processes is the synchronous secretion into the synaptic cleft a small part of the mediator molecules for each of about 1200 vesicles. Due to the diffusion of secreted mediator molecules through the space of the synaptic cleft and their subsequent reaching the postsynaptic membrane, mediator molecules bind to specific receptors located on the outer surface of the postsynaptic membrane. This leads to conformational changes in the postsynaptic membrane, which cause the activation or inhibition of ionic channels and the transmission of an electrical signal from one neuron to another, thereby carrying out the process of cell-to-cell communication.

3.2.3 Effective fractal dimension at 2d-3d crossover

This section is aimed at reviewing and studying the effects of 2d-3d dimensional crossover on the effective fractal and spatial dimensions, as well as on the critical exponents of the physical properties of bulk and bounded systems at criticality [8]. Here we consider the following problems: 1) two types of dimensional crossover and concept of universality classes; 2) a smooth 2d-3d crossover and calculation of the effective fractal and spatial dimensions as well as the effective critical indices; 3) the fractal dimension, its connection with the random

mean square order-parameter fluctuations and a new phase formation; 4) fractal nuclei of a new phase and medical consequences of carcinogenesis and nucleation isomorphism.

The main idea of this section is to study the fractal nature and fractal dimensions of the physical properties of bulk and bounded condensed systems from the point of view of the theory of phase transitions and critical phenomena. The influence of confinement on various phase transitions and critical phenomena were actively studied in many systems of experimental, theoretical and practical interest as follows: bounded fluids and liquid crystals, magnetic systems, porous media, vesicles, biomembranes, synaptic clefts, etc. In particular, the consequences of the influence of the 2d-3d dimensional crossover (DC) on the change in the fractal dimension will be considered. It should be emphasized that the direct and reverse transition between three-dimensional and two-dimensional systems cannot occur abruptly, but must be associated with a fairly smooth and continuous change in physical properties (for example, such critical parameters as critical indices of scaling laws or critical values of temperature, density, pressure, etc.). The basis for this statement is the results of theoretical studies of the layer-by-layer ordering and the DC, as well as the results of computer-simulation studies.

We studied the physical properties of bounded systems as a result of a DC of the following two types: *the 1st type*—the transition from 3d bulk systems to 3d bounded systems when the linear size L in the direction of spatial confinement approaches the correlation radius ξ of fluctuations of the order parameter (for single-component fluids—density fluctuations); *the 2nd type*—a smooth change in linear dimensions, which causes a transition between 3d and 2d systems, taking into account the corresponding changes in fractal and spatial dimensions as well as the critical indices of the physical properties of bulk and bounded systems at criticality. In connection with the 2d-3d DC, I would like to draw attention to an example that is associated with the definition of such a physical quantity as the surface tension: *the surface tension determines the average energy of the transfer of molecules from the “bulk” state to the “surface” (two-dimensional) state*. In other words, the surface tension coefficient is directly related to the DC of the 2nd type.

3.2.4 Thermal radiation of the human body

In this section (see details in [9]), we reproduced some of the earlier experimental studies of the features of thermal radiation of the human body. In

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

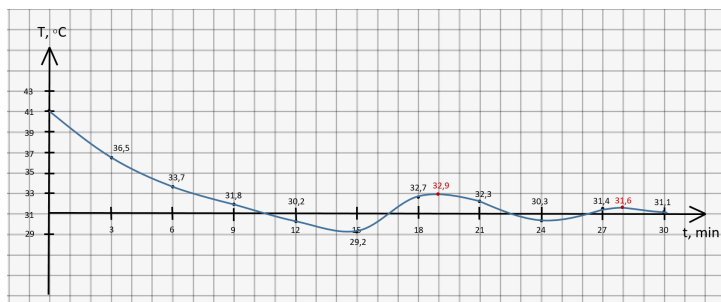


Рис. 3.2.1: The time dependence of the temperature relaxation of the human body.

particular, experimental measurements of the process of temperature relaxation (i.e., the process of gradually approaching the temperature to its equilibrium value) of the thermal radiation of the human body at a biologically active point between the thumb and forefinger on the hand were carried out. The time dependence of human skin temperature was obtained using an infrared thermometer (pyrometer) NIMBUS of the “Kharkov-device” company with the following technical characteristics: temperature measurement range from $-32\text{ }^{\circ}\text{C}$ to $420\text{ }^{\circ}\text{C}$, temperature measurement resolution $0.2\text{ }^{\circ}\text{C}$. The initial average temperature of the human skin at the biologically active point on the hand was $31\text{ }^{\circ}\text{C}$. The temperature, to which the local heating of this area of the skin occurred, was $41\text{ }^{\circ}\text{C}$, i.e., the temperature amplitude of heating was $10\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Figure 3.2.1 shows a graph of the time dependence of the temperature relaxation of the thermal radiation of the human body to its thermodynamic equilibrium value of $31\text{ }^{\circ}\text{C}$ in the coordinates “temperature T , $^{\circ}\text{C}$ – time t , minutes”. In confirmation of the conclusions made earlier, the temperature has slipped through the initial thermodynamic equilibrium value $T = 31\text{ }^{\circ}\text{C}$ by about $2\text{ }^{\circ}\text{C}$ below. The difference in the temperature amplitudes of the damped oscillations is explained by the significantly lower (approximately 2 times) initial heating amplitude.

The obtained experimental data also show that the temperature relaxation of the thermal radiation of the human body in the infrared range of electromagnetic waves does not occur according to an exponential law with a gradual approach of the body temperature from above to the thermodynamic

cally equilibrium and initial temperature $T = 31$ °C. Just such an exponential temperature change with time should be expected on the basis of the solution of the differential equation for the heat conduction processes (see, for example, monograph [9]). At the same time, in the biological systems including the human body, there are non-linear feedback connections due, as in this case, to the presence of thermal receptors conjugated with heat conduction processes. *As a result of such nonlinear feedback effects, the process of temperature relaxation is characterized by a gradual approach of temperature to its equilibrium value in the form of damped temperature oscillations in a certain area of the human body.*

In conclusion, it should be emphasized that the use of thermal radiation of the human body as a thermographic diagnostic method has a fundamental advantage over other diagnostic methods such as computer tomography (CT), magnetic resonance imaging (MRI), positron emission tomography (PET), etc., since *thermography uses the body's own thermal radiation*, and *not external radiation*, which can cause quite significant dose loads on the organs and tissues of the human body.

3.2.5 The influence of dimensional crossover on phase transitions and critical phenomena

This section is aimed at studying the effects of the dimensional crossover (DC) on physical properties of condensed systems near phase transition and critical points. Here we consider the following problems: (a) the theoretical provisions that allow to study the effect of spatial confinement on DC near phase transition and critical points; (b) the study of DC in condensed systems with the Ginzburg number $Gi < 1$, where fluctuation effects are described in different ways at the fluctuation, regular and intermediate (crossover) regions; (c) two types of DC were investigated, when (1) with decrease in the linear dimensions L to values of the correlation length of the order parameter fluctuations leads to the conversion of the dependence on thermodynamic variable into a dependence on linear sizes of $3d$ systems, as well as (2) with further decrease in linear sizes L , the 3d-2d or 3d-1d DC happens depending on slit-like or cylindrical geometry, which is determined by the value of the lower crossover dimensionality d_{LCD} ; (d) it is proposed to extend the known equalities for critical indices by using the formula for fractal dimension D as a new critical exponent; (e) the influence of 3d-2d DC on the characteristics of the fine structure of the molecular light scattering (MLS) spectrum is studied (see details in [10]).

In this regard, special attention should be paid to the following result, which was obtained in [1,2]. It turned out that the random mean-square (RMS) fluctuation of order parameters (in particular, the fluctuation of the number N of particles in the cluster with the linear size L including the early stages of new phase formation) is directly determined by the fractal dimension D in accordance with the following formula, which can be considered as a definition of the fractal dimension in the proposed approach and combines the theory of fractals with the theory of phase transitions and critical phenomena: $\langle \Delta N^2 \rangle^{1/2} \sim L^D$. To obtain this formula, the scaling hypothesis for the spatially bounded systems were used, as well as the following hyperscaling formula: $D = d - \beta/\nu$, which relates the fractal dimension D with the spatial dimension d and the critical exponents β and ν of the phase equilibrium curve (binodal) and the correlation radius of the order parameter fluctuations, respectively. To the author's knowledge, the given formula for fractal dimension D was first used explicitly in the article by Ito and Suzuki [11], then was used by the author in a report at IV International Symposium on Selected Topics in Statistical Mechanics in August 1987 and later published in the proceedings of this symposium [12].

Бібліографія

1. A.V. Chalyi. Synergetic dialogue “physics-medicine”: Hexagons in living and inanimate nature. *J. Mol. Liquids* 320, 114249 (2021).
2. Alexander Chalyi, Grid Cells in the Brain: The First Principle for Hexagon Emergence. *Online Journal of Neurology and Brain Disorders*, 5(3), 475–479 (2021).
3. A.V. Chalyi, K.A. Chalyy, E.V. Zaitseva, A.A. Kryshchtopa. Feynman's classification of natural phenomena and physical aspects of 2014 Nobel Prize in Physiology and Medicine. *Ukr. J. Phys.* 67, 736 (2022).
4. A.V. Chalyi, K.A. Chalyy, E.V. Zaitseva, E.N. Chaika, E.P. Krivenko. Physical aspects of 2014 Nobel Prize in Physiology and Medicine. 2. The first principle and universality class for grid cells in the brain. *Ukr. J. Phys.* 68 (7), 464 (2023).
5. M.E. Kriebel, B. Keller, R.B. Silver, G.D. Pappas, Porocytosis: A transient pore array secretes the neurotransmitter packet. *The Anatomical Record. Advances in integrative anatomy and evolutionary biology*, 2005.

6. J. Eccles, A.L. Hodgkin, A.F. Huxley, Nobel Lectures, Physiology or Medicine 1963–1970, Elsevier Publishing Company, 1972.
7. J.O’Keefe, M.-B. Moser, E.I. Moser, The Nobel Prize in Physiology or Medicine. Nobel Prize. org. Nobel Media AB 2020, www.nobelprize.org/prizes/medicine/2014/summary/, 2014
8. A.V. Chalyi. Effective fractal dimension at 2d-3d crossover. *Fractal fract* 6, 739 (2022). doi: 10.3390/fractalfract6120739
9. Alexander V. Chalyi. What is Medicine? Basic Principles of Physics in Medicine and Beyond. Springer Nature Switzerland AG, 2025. doi: 10/1007/978-3-031-64979-0
10. A.V. Chalyi, E.V. Zaitseva. The influence of dimensional crossover on phase transitions and critical phenomena in condensed systems. *Condensed Matter Physics* 28 (3), 33501 (2025). doi: 10.5488/cmp.28.33501
11. N. Ito, M. Suzuki. Fractal configurations of the two- and three-dimensional Ising models at the critical point. *Physics* 77, 1391–1399 (1987).
12. Chalyi, A.V. Inhomogeneous fluids near the critical point and the stability boundary, in: Intern. Symposium on Selected Topics in Statistical Mechanics, N.N. Bogolubov (Chairman Org. Com.), JINR, 405–414 (1988).

3.3 Фероелектричні нематичні рідинні кристали: нова парадигма для електрооптичних застосувань

В. Назаренко

Національна академія, Інститут фізики,
пр. Науки 46, 03028 Київ, Україна,
e-mail: vnazaren@iop.kiev.ua

3.3.1 Вступ

Портативні дисплеї, які зробили революцію в тому, як ми сьогодні представляємо інформацію, створені за допомогою оманливого простого електрооптичного пристрою, що представляє собою тонкий шар одновісного нематичного рідинного кристалу (N) між двома прозорими електродами [1,2]. Електрооптична реакція здійснюється через перебудову середньої орієнтації молекул, що називається директором \mathbf{n} , яка також є і оптичною віссю нематика. Практично всі сучасні рідиннокристалічні дисплеї створені на основі нематичних рідинних кристалів.

З 1920-х років єдиним відомим нематиком була одновісна неполярна фаза N, утворена ахіральними паличкоподібними молекулами [3,4]. В основному стані всі молекули N орієнтуються вздовж одного напрямку \mathbf{n} , без різниці між кінцями самої молекули, $\mathbf{n} = -\mathbf{n}$, Рис. 3.3.1а. Така картина нематичної фази не враховує якусь особливу роль постійних електричних диполів, які повинні нести молекули з різними кінцями. Диполі просто сприяють діелектричній проникності. Однак, найперша теорія рідинних кристалів, запропонована Борном (Max Born) у 1916 р. [5], передбачала набагато сильніший ефект, а саме існування такої рідини, в якій усі диполі спрямовані в одному напрямку. Борн навіть вважав, що його теорія була не стільки передбаченням, скільки просто поясненням таємничого на той час стану матерії, який називався «рідинними кристалами» [6]. Борн знав, що рідинні кристали утворюються паличкоподібними молекулами. У фероелектричному стані дипольні моменти молекул μ повинні бути достатньо сильними, щоб їх взаємодія витримувала теплові флуктуації. Орієнтовно, фероелектричний N повинен бути стабільним при кімнатній температурі, коли $\mu > 6D$, що є досить скромною вимогою. І все ж, фероелектричне впорядкування Борна, як універсальний механізм рідиннокристалічності, не було прийнято. По-перше, тоді не спостерігалось

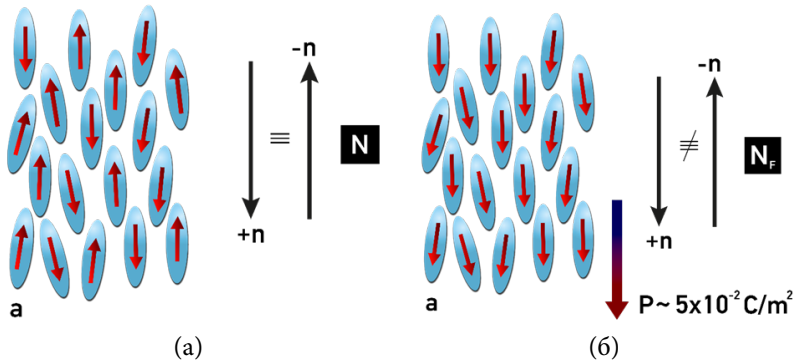


Рис. 3.3.1: Схематичні зображення полярних та неполярних рідиннокристалічних фаз: а) аполарний нематик; б) полярний нематик.

полярної реакції на електричне поле, а по-друге, були синтезовані нові рідинні кристали зі слабополярною або повністю неполярною молекулярною структурою [6]. Інша парадигма, неполярного нематика, виникла в 1920-х роках і очолила науковий і технологічний розвиток рідинних кристалів на наступні сто років.

Саме стільки часу минуло з першої публікації Борна, коли Мендл, Коулінг та Гудбі [7] синтезують високополярні паличкоподібні молекули, які демонструють одновісну N фазу та низькотемпературний нематик із невідомою структурою. Водночас, Кікучі та його співробітники [8] повідомляють, що інший матеріал з дипольним моментом $\sim 9,4D$ показує незвичайну фазу з «однонапрямленим, подібним до фероелектрика полярним розташуванням молекул», Рис. 3.3.16. Мендл та ін. [9,10] синтезували розширене сімейство полярних сполук, серед яких один із нових матеріалів має широкий температурний інтервал незвичайної нематичної фази [11]. Колективне прагнення зрозуміти поведінку такої нематичної фази завершується дослідженнями Чена та Кларка [12] про те, як поводить матеріал після охолодження рівномірно орієнтованого N під дією електричного поля. Робота демонструє, що виявлений нематик — це фероелектричний нематик (NF), передбачений Борном і утворений макроскопічними доменами, у межах яких поляризація \mathbf{P} є рівномірною, але може прийняти одну з двох допустимих орієнтацій уздовж \mathbf{n} , \mathbf{P} та $-\mathbf{P}$.

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

Це нещодавнє відкриття знайшло широкий відгук серед наукової спільноти і дозволило постулювати яскраве та чітке майбутнє для потенційних застосувань. Для рідкокристалічної спільноти, фероелектричний нематик пропонує для дослідження широкий спектр нових фізичних ефектів, починаючи від поведінки топологічних дефектів до поверхневого зчеплення, реакції на електромагнітні поля та потоки, взаємодії зв'язаних і вільних електричних зарядів, гідродинаміки, керованої полем, зв'язку поле-порядок, а також взаємодію полярності та хіральності [13]. На загал, практично будь який ефект, відомий для звичайних нематиків, має бути переосмислений для феронематиків, з урахуванням векторного поля макроскопічної поляризації. В даному короткому аналітичному огляді розглянено всього кілька проблем, найбільш актуальних для дослідження феронематиків.

3.3.2 Дослідження орієнтації директора у комірках

Відкриття нових нематиків трапляються дуже рідко — на сьогоднішній день відомі лише три, визнані за останні 120 років досліджень. NF фаза — одна з найновіших таких відкриттів. Тому першим важливим кроком у розширенні наших знань про нову NF фазу мають стати дослідження орієнтації директора в комірках, у яких нематичний шар утворений молекулами нижчої симетрії зі взаємодіями, які є не тільки анізотропними, але й полярними. Полярна природа NF призводить до трансформаційних змін у взаємодії NF з обмежуючими поверхнями, що є ключовим аспектом для застосування. Чи може структурування орієнтаційного розподілу полярних молекул в об'ємі (3D) бути досягнуто шляхом контролю полярності його двовимірних обмежуючих поверхонь (2D) [14–16]? Власне, пошук відповідної архітектури орієнтуючих шарів, які дозволять контролювати напрямок макроскопічної поляризації, буде суттєвим прогресом для всіх зацікавлених науковців.

3.3.3 Взаємодія речовина-поле

Іншим важливим напрямом є взаємодія речовина-поле. NF являє собою тривимірну рідину з макроскопічною електричною поляризацією \mathbf{P} [12,17,18]. На нанорівні кожен молекулярний диполь повинен бути майже паралельним своїй довгій осі. Результуюча спонтанна поляризація забезпечує індуковану полем переорієнтацію нематичного директора та відпо-

відний електрооптичний відгук до прикладених полів порядку ~ 1 В/см, що в тисячу разів менші, ніж ті, що використовуються для переорієнтації діелектричних нематиків. Не слід вважати, що легкість, з якою можна перемикаєти NF, автоматично поширюється на всі деформації, а особливо на *splay*. Деформація *splay* створює зв'язаний електричний заряд щільності $\rho = -\text{div } P$, який обмежує варіації поляризаційного поля $P(\mathbf{r})$, явище також відоме для твердих і смектичних фероелектриків [19]. Об'ємний і поверхневий заряди, викликані просторовою зміною P , викликають нові особливості в поведінці доменних стінок, гідродинаміки та електрооптики NF. Наприклад, *splay*-перехід Фредерікса вважався забороненим в NF. Зовсім недавно було показано, що під дією змінного електричного поля поляризація може набувати стаціонарних спотворень, спочатку розвиваються деформації *splay* та *twist* у вигляді полосових доменів, а при більших напругах реалізуються у вигляді квадратної решітки дефектів $+1$ та -1 . Виникнення цих стаціонарних деформацій зумовлене балансом діелектричного та пружного моментів. У полосових доменах *splay-twist* деформація має геометричне рішення з компенсацією $\text{div } P$ та пов'язаного з ним зв'язаного заряду: *splay* у вертикальній площині $\partial P_z / \partial z$, викликаний зовнішнім електричним полем, нівелюється деформацією в іншій площині $\partial P_y / \partial y$ протилежної полярності, так, що $\partial P_y / \partial y + \partial P_z / \partial z \rightarrow 0$ [20].

Майбутні дослідження в цьому напрямі мають показати практичну цінність цієї нової парадигми в розробці нематичних електрооптичних приладів, в яких, замість традиційного підходу до діелектричної переорієнтації оптичної осі під дією електричного поля, використовуються ефекти, пов'язані з макроскопічною електричною поляризацією в фероелектричних нематиках.

3.3.4 Взаємодія полярності та хіральності

Зазвичай, макроскопічна хіральність матеріалів вимагає хімічної, спричиненої асиметричним атомом вуглецю, хіральності складових молекул. Перетворення нематика (N) на холестерик (N*) є добре відомим прикладом [1,21,22]. Фаза N, утворена ахіральними молекулами, демонструє одновісний 3D орієнтаційний порядок, що описується аполярним вектором $\mathbf{n} \equiv -\mathbf{n}$, який називається директором [1], що підкреслює відсутність різниці між кінцями самої молекули. Коли хіральні молекули додаються до N, утворюється холестерична фаза N*. Локально, N* подібний до N, оскільки молекули орієнтуються майже паралельно одна одній. Однак,

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

глобально, директор N^* демонструє гелікоїдальний розподіл. Крок гелікоїда, часто ~ 1 мкм, набагато більший за молекулярний масштаб, ~ 1 нм, що відображає відносну слабкість хіральных молекулярних взаємодій, індукованих асиметричним атомом вуглецю. Ще з 1920-х років єдиним відомим N був одновісний неполярний нематик, утворений ахіральними молекулами [23]. В останнє десятиліття ця парадигма зазнала краху через відкриття нових рідкокристалічних матеріалів з великими молекулярними диполями ($\sim 10D$) та полярною структурою [7–9], ідентифікованою Ченом та ін. [12] як тривимірною одновісною NF фаза зі спонтанною електричною поляризацією P . Антипаралельно напрямки поляризації фізично різні, $P \neq -P$. NF є рідинним аналогом твердих фєроелектриків, відкритих у 1920 році [24]. Наступне століття та сучасність ознаменувалися численними застосуваннями твердих фєроелектриків у конденсаторах, блоках пам'яті, датчиках, дозаторах, інжекторах рідини, каталізаторах, фазових радарах [25], мікрохвильових та бездротових технологіях 5G і перспективні для негативної ємності [26]. Відомою властивістю твердих фєроелектриків є їхня доменна структура, яка зменшує електростатичну енергію, змінюючи орієнтацію поляризації P від одного домена до іншого [27–30]. У кожному домені P обмежена орієнтацією вздовж однієї з кристалографічних осей; щоб відхилити P від такого напрямку, необхідно прикласти значні електричні поля. Рідина NF не має кристалографічних осей. Це означає, що переорієнтація P в NF може бути безперервною без енергетичних бар'єрів. Саме тому NF є надзвичайно чутливий до електричних полів [12,31–34]. Як було сказано в попередньому пункті, деформації P можуть бути створені полями ~ 1 В/см, які на три порядки слабші за поля, що викликають деформації в N . Іншим наслідком, теоретично передбаченим Хачатуряном [35], але поки що експериментально не підтвердженим, є те, що основний стан NF може бути холестерикоподібним. Можна розглядати хіральный стан NF як «безперервний» аналог доменів у твердих фєроелектриках. Закручування векторів поляризації P розділяє однорідні заряди на сусідніх молекулах далі один від одного, що зменшує електростатичну енергію. За відсутності експериментальних доказів хіральных станів NF, спричинених полярним упорядкуванням, прийнято вважати, що NF-упорядкування — це тривимірною одновісною орієнтація електричної поляризації P вздовж одного полярного напрямку в просторі [12,13,36–38]. Така ідентифікація базується на експериментах у сендвіч-комірках, зроблених методом, загальноприйнятим у дослідженнях та застосуваннях N . А саме, матеріал розміщується

між двома плоскими скляними пластинами, які, за рахунок спеціальної обробки, накладають певний напрямок молекулярної орієнтації на поверхні. Цей напрямок орієнтації зазвичай створюється механічним натиранням полімерного шару, нанесеного на скло. Якщо натирка є односпрямованою вздовж певного напрямку R , результуюча орієнтація P є полярною в площині пластини. Оскільки рідинні кристали передають крутні моменти [1,22], об'ємна структура визначається цими зовнішніми поверхневими взаємодіями. Сендвіч-комірка з обома пластинами, що забезпечують однонаправлену орієнтацію, таким чином, нездатна виявити можливість спонтанної хіральності. Рівноважний стан NF між двома натертими пластинами є або одновісним монокристалом (R -напрямки паралельні), або π -закрученим (R -напрямки антипаралельні) [12,15,39]. Ці експерименти призвели до висновку, що NF фаза є тривимірно одновісно впорядкованою. Однак питання полягає в тому, чи буде цей висновок про однонаправлений порядок справедливим, коли немає обробки поверхні, яка визначає об'ємну структуру [40].

Відкриття нематичної фероелектричної фази започатковує новий розділ в науці та техніці м'якої речовини. Це відкриття додає особливий елемент до великої групи твердих фероелектриків, які є надзвичайно перспективними та знаходять застосування, наприклад, у запам'ятовуючих пристроях. Однією з характеристик усіх рідинних кристалів є їх надзвичайно малі пружні константи порівняно з твердими матеріалами. Це, в свою чергу, означає, що в твердому стані дефекти поширюються на кілька атомів, а топологічні дефекти в рідинних кристалах поширюються на відстані в десятки мікрометрів, тому їх можна легко спостерігати, використовуючи методи стандартної поляризаційної мікроскопії. Таким чином, окрім добре відомих застосувань рідинних кристалів в електрооптичних пристроях і дисплеях, телекомунікаційних технологіях або фотоніці, фероелектричний нематик відкриває абсолютно нове поле для використання рідинних кристалів, як локомотива фундаментальних фізичних досліджень в інших областях та створення нових матеріалів та пристроїв. Фероелектричні нематик, безумовно, зіграють свою роль у розвитку цих досліджень.

Бібліографія

1. P.G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd ed., Clarendon Press, Oxford, 1993.

2. D. K. Yang and S. T. Wu, *Fundamentals of Liquid Crystal Devices* (John Wiley, NY, 2006).
3. P.J. Collings, M. Hird, *Introduction to Liquid Crystals: Chemistry and Physics*, Taylor&Francis, London, 1997.
4. Bremer M, Kirsch P, Klasen-Memmer M, et al. The TV in your pocket: development of liquid-crystal materials for the New Millennium. *Angew Chem Int Ed.* 2013; 52:8880–8896.
5. M. Born, Über anisotrope Flüssigkeiten. Versuch einer Theorie der flüssigen Kristalle und des elektrischen Kerr-Effekts in Flüssigkeiten. *Sitzungsber. Preuss. Akad Wiss.* 30, 614–650 (1916).
6. T. J. Sluckin, D. A. Dunmur, H. Stegemeyer, *Crystals That Flow: Classic Papers from the History of Liquid Crystals* (Taylor & Francis, London, UK; New York, NY, 2004).
7. R. J. Mandle, S. J. Cowling, J. W. Goodby, A nematic to nematic transformation exhibited by a rod-like liquid crystal. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19, 11429–11435 (2017).
8. H. Nishikawa et al., A fluid liquid-crystal material with highly polar order. *Adv. Mater.* 29, 1702354 (2017).
9. R. J. Mandle, S. J. Cowling, J. W. Goodby, Rational design of rod-like liquid crystals exhibiting two nematic phases. *Chemistry* 23, 14554–14562 (2017).
10. Sebastian N., Cmok L., Mandle R. J., et al. Ferroelectric-ferroelastic phase transition in a nematic liquid crystal. *Phys Rev Lett.* 2020; 124:037801.
11. A. Mertelj et al., Splay nematic phase. *Phys. Rev. X* 8, 041025 (2018).
12. X. Chen et al., First-principles experimental demonstration of ferroelectricity in a thermotropic nematic liquid crystal: Polar domains and striking electro-optics. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, 10.1073/pnas.2002290117 (2020).
13. Lavrentovich O. D., Ferroelectric nematic liquid crystal, a century in waiting. *Proc. Nat. Acad. Sci.*;2020 (117):14629.

14. Caimi, F.; Nava, G.; Barboza, R.; Clark, N. A.; Korblova, E.; Walba, D. M.; Bellini, T.; Lucchetti, L. Surface Alignment of Ferroelectric Nematic Liquid Crystals. *Soft Matter* 2021, **17** (35), 8130.
15. Basnet, B.; Rajabi, M.; Wang, H.; Kumari, P.; Thapa, K.; Paul, S.; Lavrentovich, M. O.; Lavrentovich, O. D. Soliton Walls Paired by Polar Surface Interactions in a Ferroelectric Nematic Liquid Crystal. *Nat. Commun.* 2022, **13** (1), 1.
16. Chen, X.; Korblova, E.; Glaser, M. A.; MacLennan, J. E.; Walba, D. M.; Clark, N. A. Polar In-Plane Surface Orientation of a Ferroelectric Nematic Liquid Crystal: Polar Monodomains and Twisted State Electro-Optics. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2021, **118** (22), e2104092118.
17. Paul, A. et al. Comprehensive Characterization of a Reference Ferroelectric Nematic Liquid Crystal Material. *Materials* **18**, 5496 (2025). doi: 10.3390/ma18245496
18. Mandle, R. J., Cowling, S. J. & Goodby, J. W. Rational Design of Rod-Like Liquid Crystals Exhibiting Two Nematic Phases. *Chem-Eur J* **23**, 14554–14562 (2017).
19. E. A. Eliseev, A. N. Morozovska, G. S. Svechnikov, V. Gopalan, V. Y. Shur, Static conductivity of charged domain walls in uniaxial ferroelectric semiconductors. *Phys. Rev. B* **83**, 235313 (2011).
20. Basnet, B. et al. Periodic splay Fréedericksz transitions in a ferroelectric nematic. *Nature Communications* **16**, 1444 (2025).
21. R. G. Larson, *The structure and rheology of complex fluids*, Topics in chemical engineering (Oxford University Press, New York, 1999).
22. M. Kleman, O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction*. L. Lam, Ed., *Partially Ordered Systems* (Springer, New York, 2003), pp. 638.
23. T. J. Sluckin, D. A. Dunmur, H. Stegemeyer, *Crystals that flow*. G. W. Gray, J. W. Goodby, A. Fukuda, Eds., *The Liquid Crystals Book Series* (Taylor & Francis, London and New York, 2004), pp. 740.
24. J. Valasek, Piezo-electric and allied phenomena in Rochelle salt. *Phys Rev* **17**, 475–481 (1921).

25. J. F. Scott, Applications of modern ferroelectrics. *Science* **315**, 954–959 (2007).
26. J. Iniguez, P. Zubko, I. Luk'yanchuk, A. Cano, Ferroelectric negative capacitance. *Nat Rev Mater* **4**, 243–256 (2019).
27. G. Catalan, J. Seidel, R. Ramesh, J. F. Scott, Domain wall nanoelectronics. *Rev Mod Phys* **84**, 119–156 (2012).
28. G. F. Nataf, M. Guennou, J. M. Gregg, D. Meier, J. Hlinka, E. K. H. Salje, J. Kreisel, Domain-wall engineering and topological defects in ferroelectric and ferroelastic materials. *Nat Rev Phys* **2**, 634–648 (2020).
29. K. A. Hunnestad, E. D. Roede, A. T. J. van Helvoort, D. Meier, Characterization of ferroelectric domain walls by scanning electron microscopy. *J Appl Phys* **128**, 191102 (2020).
30. L. W. Martin, A. M. Rappe, Thin-film ferroelectric materials and their applications. *Nat Rev Mater* **2**, 16087 (2017).
31. P. Kumari, B. Basnet, H. Wang, O. D. Lavrentovich, Ferroelectric nematic liquids with conics. *Nature Communications* **14**, 748 (2023).
32. J. Szydłowska, P. Majewski, M. Cepic, N. Vaupotic, P. Rybak, C. T. Imrie, R. Walker, E. Cruickshank, J. M. D. Storey, P. Damian, E. Górecka, Ferroelectric Nematic-Isotropic Liquid Critical End Point. *Phys Rev Lett* **130**, 216802 (2023).
33. N. Sebastian, M. Lovsin, B. Berteloot, N. Osterman, A. Petelin, R. J. Mandle, S. Aya, M. J. Huang, I. Drevensek-Olenik, K. Neyts, A. Mertelj, Polarization patterning in ferroelectric nematic liquids via flexoelectric coupling. *Nature Communications* **14**, 3029 (2023).
34. J. X. Li, H. Nishikawa, J. Kougo, J. C. Zhou, S. Q. Dai, W. T. Tang, X. H. Zhao, Y. Hisai, M. J. Huang, S. O. S. Aya, Development of ferroelectric nematic fluids with giant-epsilon dielectricity and nonlinear optical properties. *Science Advances* **7**, eabf5047 (2021).
35. A. G. Khachatryan, Development of Helical Cholesteric Structure in a Nematic Liquid-Crystal Due to Dipole-Dipole Interaction. *J Phys Chem Solids* **36**, 1055–1061 (1975).

36. P. Kumari, O. Kurochkin, V. G. Nazarenko, O. D. Lavrentovich, D. Golovaty, and P. Sternberg, Conic sections in ferroelectric nematics: Experiments and mathematical modeling, *Phys. Rev. Research* **6**, 043207 (2024).
37. N. Sebastián, L. Cmok, R. J. Mandle, M. R. de la Fuente, I. D. Olenik, M. Čopič, A. Mertelj, Ferroelectric-Ferroelastic Phase Transition in a Nematic Liquid Crystal. *Phys Rev Lett* **124**, 037801 (2020).
38. N. Sebastián, M. Čopič, A. Mertelj, Ferroelectric nematic liquid-crystalline phases. *Phys Rev E* **106**, 021001 (2022).
39. N. Yadav, Y. P. Panarin, W. H. Jiang, G. H. Mehl, J. K. Vij, Spontaneous mirror symmetry breaking and chiral segregation in the achiral ferronematic compound DIO. *Physical Chemistry Chemical Physics* **25**, 9083–9091 (2023).
40. P. Kumari, B. Basnet, M. Lavrentovich and O. Lavrentovich, Chiral ground states of ferroelectric liquid crystals, *Science* **383**, 1364–1368 (2024).

3.4 Моделювання структурних та динамічних властивостей ДНК з протийонами

С.М. Перепелиця

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова
Національної академії наук України,
e-mail: perepelytsya@bitp.kyiv.ua

Досліджено структурні та динамічні властивості різних систем ДНК з протийонами. Зокрема, побудовано модель конформаційних коливань ДНК з молекулами води в мінорному жолобі подвійної спіралі. В результаті визначено моди трансляційних коливань молекул води у гідратному хребті і показано, що ці моди локалізуються в низькочастотному діапазоні $165\text{--}210\text{ см}^{-1}$ та залежать від послідовності нуклеотидних пар. Також передбачено ізотопічний зсув близько 10 см^{-1} при заміні H_2O на D_2O . Методами молекулярної динаміки досліджено колективні коливання молекул води в гідратній оболонці ДНК ($<300\text{ см}^{-1}$) і встановлено їх відмінність від динаміки об'ємної води, що проявляється у зміщенні характерних мод у бік вищих частот. Розроблено поліелектролітну модель розподілу протийонів між внутрішніми та зовнішніми ділянками макромолекули і показано, що всередині ДНК у середньому локалізується близько 0,22 протийонів на фосфатну групу, що узгоджується з результатами молекулярно-динамічних симуляцій. Для молекулярних протийонів методами молекулярної динаміки досліджено механізми формування міжспіральних зшивок у випадку спермідину³⁺. Ключову роль у формуванні контактів відіграє конформаційна гнучкість поліаміну, причому найбільш вигнуті конформації формуються саме при взаємодії з ДНК. В рамках молекулярно-динамічного дослідження вперше охарактеризовано взаємодію молекул пероксиду водню з ДНК. Отримані результати є важливими для розуміння фізичних механізмів функціонування ДНК у водно-іонному середовищі та для розвитку ДНК-орієнтованих біо- і нанотехнологій.

3.4.1 Вступ

Молекула ДНК є центральною молекулою життя, в якій міститься генетична інформація про організм у вигляді послідовності нуклеотидів – аденіну (А), гуаніну (G), тиміну (Т) та цитозину (С). Відкрита у 1953 році структури молекули ДНК у вигляді подвійної спіралі Джеймсом Уотсоном,

Френсісом Кріком, Морісом Уїлкінсом, Розалінд Франклін та іншими вченими [1–3] ознаменувало початок нових напрямів досліджень, які швидко стали окремими розділами в біології, хімії, фізиці та багатьох міждисциплінарних науках. Проведення досліджень в цих напрямках впродовж багатьох десятиліть дали можливість визначити фундаментальні основи багатьох процесів, де задіяна макромолекула ДНК. Зараз розуміння механізмів біологічного функціонування молекули ДНК вийшло на новий рівень, де фундаментальні знання вже використовуються в практичних цілях, зокрема, в різних біотехнологічних, біомедичних застосуваннях. З'явився окремий напрям – молекулярна медицина, що робить можливим здійснення терапії різних захворювань на генетичному рівні. Проте незважаючи на визначальну роль ДНК в живому організмі, дедалі вагомішим стає напрям, що пов'язаний з дослідженнями фізичних властивостей цієї макромолекули для застосування як функціонального матеріалу [4]. ДНК має низку унікальних властивостей, що робить її привабливою з цієї точки зору. Серед таких властивостей слід відзначити здатність ДНК до самозбирання, її перманентний негативний заряд (поліаніон), електронні властивості системи та широка прискотність в природі.

Явище самозбирання подвійної спіралі ДНК безпосередньо обумовлено її структурною організацією. Як відомо, ланцюжок подвійної спіралі ДНК складається з пар нуклеотидів, що зв'язані між собою водневими зв'язками комплементарним чином: аденін завжди зв'язується з тиміном (А-Т), а гуанін з цитозином (G-C). Це так зване правило комплементарності, яке було відкрите американським хіміком українського походження Ервіном Чаргаффом [5,6]. Якщо ДНК нагріти до температури плавлення, яка лежить в діапазоні від 45 до 90 °С, залежно від послідовності пар нуклеотидів, іонної сили розчину, кислотності та інших факторів, водневі зв'язки в парах руйнуються і подвійна спіраль розплітається (денатурує). Проте при поступовому зниженні температури відбувається зворотній процес, де водневі зв'язки відновлюються і ДНК знову стає двоспіральною. Так само, якщо у розчин додати два комплементарні ланцюжки односпіральної ДНК, то вони з'єднаються за тим самим принципом. Виявилося можливим проектування ланцюжків ДНК зі спеціально заданими послідовностями нуклеотидів так, аби вони збиралися у вигляді певних фігур необхідної форми [7]. Така техніка отримала назву ДНК-орігамі, за аналогією з японською технікою виготовлення різноманітних фігур шляхом згортання паперових листів. Зараз ДНК-орігамі вже застосовується в багатьох технологіях [9].

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

Властивості молекули ДНК як поліелектроліту були відомі з самого початку пошуку правильної структури молекули ДНК. Фосфатні групи остова подвійної спіралі у водному розчині при значеннях рН, близьких до фізіологічних, знаходяться у депротонованому стані та мають некомпенсований негативний заряд, що зумовлює негативний заряд фосфатної групи $-e$ [8]. Для того, аби стабілізувати подвійну спіраль ДНК, фосфатні групи мають бути нейтралізовані. Роль нейтралізуючих зарядів відіграють іони металів, або молекулярні іони, які називають протийонами. Протийони разом з молекулами води формують навколо подвійної спіралі ДНК іон-гідратну оболонку, яка має особливу структуру, що відрізняється від структури об'ємного розчину [10,11]. Пряму вказівку на те, що негативний заряд фосфатних груп відіграє визначальну роль в структуроутворенні подвійної спіралі було зроблено ще в перших експериментальних роботах Розалінд Франклін з рентгеноструктурного аналізу вологих волокон ДНК [12]. Вагомі результати, що стосуються проблеми гідратації ДНК та інших біомолекул були одержані, зокрема, українськими вченими в Харкові [13,14].

Важливою з точки зору застосування ДНК як функціонального матеріалу є властивість проводити електричний струм. Проблема провідності ДНК досліджувалася з середини минулого століття і зараз ще не є до кінця вирішеною. Вважається, що електронна провідність ДНК дуже незначна і виникає за рахунок двох механізмів перенесення заряду між π -електронними орбіталями азотистих основ ДНК. Перший механізм це тунелювання, а другий – стрибки між основами [15]. Проте для практичних цілей, де молекула ДНК може використовуватися як провідник нанорозміру, величина провідності є надто малою (струми порядку наноампер). Суттєве покращення можна очікувати, коли в ДНК будуть вбудовані іони металів, наприклад, Ag^+ , Hg^{2+} та інші. В середині подвійної спіралі такої металізованої ДНК утворюється ланцюжок іонів металів, які можуть розглядатися як нанопровідник [16]. Також слід зазначити, що ДНК характеризується іонною провідністю, обумовленою протийонами. Саме ця властивість систем ДНК з протийонами обумовлює широке їх використання в різноманітних технологіях, наприклад, в Li-іонних суперконденсаторах, де як електроліт використовується ДНК [17,18].

Важливим аспектом з точки зору застосування ДНК як матеріалу є те, що вона є широко поширеною в біосфері. Детальне дослідження загальної кількості ДНК на Землі було проведено у роботі [19] на основі аналізу біомаси різних організмів. Отримані результати показали, що сумарна кіль-

кість ДНК становить приблизно $5.5 \cdot 10^{14}$ кг, що за порядком величини є порівнянним із світовими запасами нафти. Слід також зазначити, що для отримання ДНК можуть використовуватися відходи харчової промисловості, що також має важливе значення для вирішення проблем утилізації відходів [18].

Для розуміння фізичних властивостей ДНК як функціонального матеріалу важливою є побудова спеціальних моделей, а також здійснення комп'ютерних симуляцій для даних систем. У представленому огляді будуть окреслені результати досліджень систем ДНК у присутності протийонів, що були одержані в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України у співпраці з колегами з інших наукових центрів Європи протягом останніх п'яти років. Звіт включає чотири наступні частини. В першій частині описуються результати моделювання іон-гідратної оболонки ДНК. В другій частині описуються розвинута поліелектролітна модель ДНК. В третьому розділі окреслено результати моделювання ДНК з молекулами поліамінів. В четвертій частині наведено основні результати моделювання для молекули ДНК з пероксидом водню.

3.4.2 Структурні та динамічні властивості іон-гідратної оболонки ДНК

Структура та динаміка іон-гідратної оболонки ДНК має свою просторову й часову ієрархію. Просторово молекули води, що розташовуються навколо ДНК, поділяють на три гідратні шари [13,14]. До першого належать молекули, що безпосередньо взаємодіють з атомними групами ДНК (фосфатні групи остова макромолекули, азотисті основи мінорного і головного жолобів подвійної спіралі). До другого гідратного шару відносять молекули води, які формують водневі зв'язки з атомами молекул води першої гідратної оболонки. Третій шар є проміжним між другим та об'ємною водою (Рис. 3.4.1). В часовому масштабі динаміка молекул води може розглядатися в розумінні коливань відносно положення рівноваги з характерним часом порядку 0.1 пс (період трансляційних коливань), перестрибування з одного рівноважного положення в інше з характерним часом осідлого життя від 1 до 100 пс і гідродинамічний рух, що має широкий діапазон часів релаксації.

Протийони навколо ДНК формують хмару (атмосферу), що екранує негативний заряд. За типом зв'язування з ДНК їх можна умовно поділити на зв'язані і вільні. Зв'язані іони безпосередньо взаємодіють з атомами ма-

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

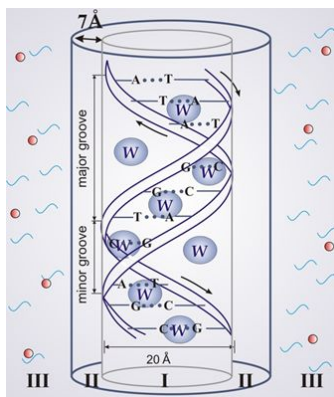


Рис. 3.4.1: Іон-гідратна оболонка ДНК (за даними [13,14]). На рисунку зображено внутрішні області подвійної спіралі молекули ДНК (мінорний жолоб та головний жолоб), а також області гідратної оболонки ДНК (I, II та III гідратні оболонки). Молекули води внутрішньої гідратної оболонки схематично зображено у вигляді сфер W ; протийони позначено червоними кульками.

кромолекули, а вільні перебувають на певній відстані проте також суттєво взаємодіють з атомами ДНК через далекосяжність електростатичних взаємодій. Протийони мають також свою власну гідратну оболонку, яка має різну структуру у випадку різних іонів. За характером гідратації іони поділяють на позитивно гідратовані, які сильно зв'язують молекули води гідратної оболонки (Li^+ , Na^+), і негативно гідратовані, які роблять структуру води рихлою (K^+ , Cs^+). Гідратна оболонка іонів стає невід'ємною частиною гідратної оболонки ДНК. Таким чином, молекули води і протийони формують навколо подвійної спіралі ДНК систему взаємопов'язаних частинок, поведінка якої має складний досі не до кінця вивчений характер.

Іон-гідратна оболонка навколо ДНК характеризується товщиною біля 7–10 Å і має особливу структуру, яка суттєво відрізняється від структури, що формується молекулами води в об'ємі. Особливо яскраво це проявляється у випадку молекул води в мінорному жолобі, де було експериментально виявлено існування впорядкованої системи молекул води, яка отримала назву гідратного хребта (*hydration spine*) [20]. Молекули води, що формують гідратний хребет, з'єднують водневими зв'язками атоми-

3.4. Моделювання властивостей ДНК з протійонами

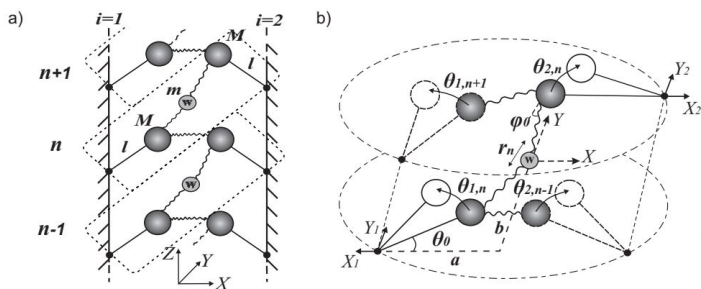


Рис. 3.4.2: Модель коливної динаміки молекул води в гідратному хребті подвійної спіралі ДНК [22]: (а) мономерні ланки моделі; (б) рухи структурних елементів моделі в мономерній ланці.

акцептори на азотистих основах різних тяжів подвійної спіралі ДНК. Молекули води в гідратному хребті характеризуються найбільшим часом осідлого життя, що може досягати наносекундного діапазону [10,11,21], і на порядки перевищує характерний період коливань молекули води як цілої в положенні рівноваги. Для з'ясування характеру коливань молекул води в мінорному жолобі ДНК в роботі [22] було побудовано спеціальну модель конформаційних коливань ДНК. За основу було взято модель конформаційних коливань подвійної спіралі ДНК Волкова–Косевича [23].

Модель представляє ланцюжки молекули ДНК у вигляді жорстких стінок, до яких приєднано нуклеозиди (дезоксирибоза+азотиста основа) у вигляді фізичних маятників, що характеризуються зведеною довжиною l . Маятники-нуклеозиди з'єднані між собою водневими зв'язками. Молекули води розташовані в мінорному жолобі ДНК і з'єднують нуклеозиди різних ланцюжків (Рис. 3.4.2а). Нуклеозиди можуть здійснювати ротаційні коливання по координаті θ в площині, ортогональній осі подвійної спіралі, а також можуть здійснювати зміщення як цілого за координатами X та Y . Коливання молекули води описуються координатою r (Рис. 3.4.2б).

У рамках розвинутої моделі вдалося одержати аналітичні вирази для частот і амплітуд коливань структурних елементів ДНК і молекул води в гідратному хребті. Для проведення порівняння з існуючими експериментальними даними було здійснено оцінки частот коливань молекул води в мінорному жолобі в залежності від послідовності пар нуклеотидів. Структурні параметри моделі і силові константи коливань маятників-

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

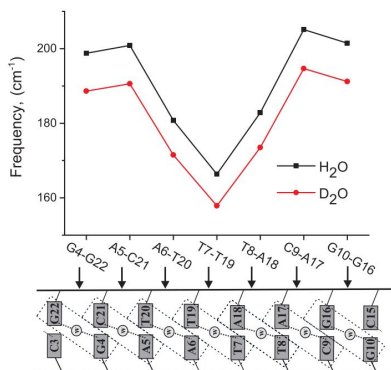


Рис. 3.4.3: Залежність частоти трансляційних коливань молекули води від послідовності пар нуклеотидів ДНК [22]. Внизу схематично зображено послідовність азотистих основ у подвійній спіралі ДНК і розташування молекул води в структурі гідратного хребта.

нуклеозидів взято такими, як в оригінальній моделі Волкова–Косевича [23]. Силкові константи, що описують коливання молекули води, визначено на основі даних молекулярної динаміки [24]. Оцінки показали, що моди коливань молекул води знаходяться в низькочастотному діапазоні спектру в околі від 165 до 210 см^{-1} і залежать від послідовності пар нуклеотидів. На експерименті в цьому діапазоні спостерігається широка смуга трансляційних коливань молекул води з центром біля 180 см^{-1} [25]. Аби виділити з цієї смуги коливання молекул води саме гідратної оболонки ДНК треба проводити додатковий аналіз. Додатково зроблено оцінки частот у випадку важкої води. Розрахунки показали, що моди коливань молекул води має бути суттєвим ізотопічний зсув у випадку заміни H_2O на D_2O , який складає приблизно 10 см^{-1} (Рис. 3.4.3). Це може бути використано для експериментального виявлення коливань водного хребта мінорного жолоба подвійної спіралі ДНК.

Для розуміння динаміки всієї системи гідратної оболонки ДНК необхідно враховувати значно більше молекул води. В цьому випадку аналітичний розгляд задачі значно ускладнюється. У зв'язку з цим виявляються незамінними методи числового моделювання, зокрема метод молекулярної динаміки. В роботі [26] було виконано молекулярно-динамічне

3.4. Моделювання властивостей ДНК з протійонами

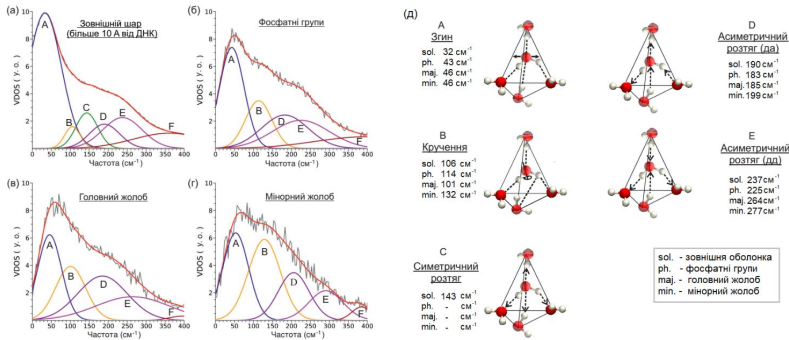


Рис. 3.4.4: Характеристики коливань молекул води в іон-гідратній оболонці ДНК [26]. Спектри густини коливальних станів молекули води у третій гідратній оболонці ДНК (а), біля фосфатних груп остова макромолекули (б), у головному (в) та мінорному (г) жолобах подвійної спіралі. На спектрах гаусіани А–F – окремі моди коливань спектру, червона лінія – сума цих мод; (д) схематичне зображення мод коливань молекул води у кластерах, де ‘да’ позначає протифазні коливання донора та акцептора водневого зв’язку, ‘дд’ позначає зміщення молекул у протифазі, які є донорами водневого зв’язку.

дослідження коливальної динаміки іон-гідратної оболонки системи ДНК в розчині з іонами калію. В результаті було розраховано автокореляційні функції швидкостей і спектри густини коливальних станів для молекул води, що перебувають в різних областях навколо подвійної спіралі: в мінорному та головному жолобах ДНК, та біля фосфатних груп остова макромолекули. В результаті вдалося проаналізувати характерні моди коливань молекул води в діапазоні частот до 400 cm^{-1} (Рис. 3.4.4).

Аналіз показав, що даний діапазон спектру можна описати шістьма модами коливань (А–F), положення яких залежить від області подвійної спіралі (Рис. 3.4.4д). Для об’ємної фази суттєвими є усі моди: коливання молекули води як єдиної цілої, що супроводжується згином водневих зв’язків (мода А); кручення молекули води (мода В); симетричний розтяг водневих зв’язків (мода С); моди асиметричного розтягу водневих зв’язків (моди D і E). Характер коливань молекул води навколо ДНК суттєво відрізняється від характеру коливань води в об’ємній фазі. Зокрема, спосте-

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

рігаються частотні зсуви у випадку усіх мод, а мода С зникає зі спектрів ДНК (Рис. 3.4.4д).

Для визначення впливу іонів на колективну динаміку іон-гідратного шару ДНК в роботі [27] в рамках методів класичної молекулярної динаміки було виконано спеціальне дослідження коливальних спектрів ДНК з протийонами лужних металів Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ та Cs^+ . Результати показали, що вплив протийонів на коливальні спектри ДНК є незначним, за винятком іонів Li^+ . Це обумовлено тим, що вони інтенсивно взаємодіють з фосфатними групами подвійної спіралі. В результаті у коливальному спектрі ДНК з'являється мода біля $\sim 820 \text{ см}^{-1}$, що не спостерігається у випадку інших іонів лужних металів. Поява даної моди була віднесена до прояву іон-фосфатних коливань. Також було виявлено якісну різницю в спектрах ДНК з позитивно гідратованими протийонами (Li^+ та Na^+) та негативно гідратованими протийонами (K^+ , Rb^+ та Cs^+). У всіх розрахованих коливальних спектрах молекул води гідратної оболонки протийонів виникає ізобестична точка близько 70 см^{-1} . Аналіз показав, що виникнення цієї ізобестичної точки пов'язане з обмеженням мобільності (конфайнмент) молекул води, спричиненого ДНК та іонами.

3.4.3 Модель конденсації протийонів в жолобах подвійної спіралі ДНК

Негативний заряд молекули ДНК екранується протийонами, які конденсуються на макромолекулі. Ефект конденсації протийонів на ДНК було передбачено ще в рамках найпростіших моделей [28,29] і було підтверджено в низці експериментів. Наприклад, в експериментах з малокутового розсіяння рентгенівських променів на ДНК протийони спостерігалися як хмара навколо макромолекули [30]. Водночас, сконденсовані протийони розподіляються навколо ДНК у різних областях подвійної спіралі, тому хмару протийонів можна умовно розділити на внутрішню та зовнішню області. Серед внутрішніх областей ДНК – мінорний жолоб і головний жолоб подвійної спіралі, тоді як зовнішня область – шар між поверхнею ДНК і розчином (Рис. 3.4.5а). Існуючі моделі не дають можливість розрізнити різні області подвійної спіралі, тоді як проблема розподілу протийонів навколо ДНК є центральною для даної системи.

З урахуванням відмінності протийонів у внутрішній та зовнішній областях ДНК в роботі [31] розроблено аналітичну модель для опису захоплення одновалентних протийонів усередині жолобів подвійної спіра-

3.4. Моделювання властивостей ДНК з протийонами

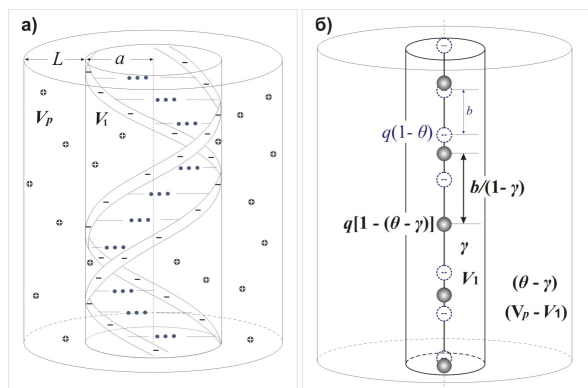


Рис. 3.4.5: Модель захоплення протийонів всередині ДНК [31]: (а) внутрішні і зовнішні області ДНК, де можуть локалізуватися протийони; (б) ланцюжок зарядів з внутрішньою (V_1) та зовнішньою ($V_p - V_1$) областями. На рисунку b і b' – відстань між зарядами поліаніону до та після перенормування внаслідок екранування, γ і θ – кількість протийонів на одну фосфатну групу всередині та поза макромолекулою, відповідно.

лі. За основу взято модель теорії конденсації протийонів Меннінга [29]. У розробленій моделі макромолекула ДНК представлена як нескінченний ланцюжок зарядів. Загальна кількість сконденсованих протийонів на одну фосфатну групу становить θ . Здатність поліаніону захоплювати протийони всередину макромолекули описується параметром захоплення γ . Цей параметр моделі вводиться спеціально, аби охарактеризувати кількість протийонів на одну фосфатну групу, що розташовуються всередині ДНК (Рис. 3.4.5б). Внутрішніми областями ДНК, до яких можуть потрапляти протийони, є мінорний та головний жолоби подвійної спіралі.

В результаті за допомогою розвиненої моделі було визначено, що кількість протийонів, які можуть бути захоплені всередині жолобів подвійної спіралі ДНК, становить від 0,16 до 0,43 на одну фосфатну групу. Для валідації розробленої моделі в роботі [31] також було проведено молекулярно-динамічне моделювання фрагменту В-ДНК у водному розчині з протийонами K^+ . Дані моделювання показують, що в середньому кількість іонів усередині жолобів подвійної спіралі становить близько 0,22 на одну фосфатну групу, що підтверджує результати запропонованої моделі.

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

Використовуючи оцінені значення частки протийонів, захоплених усередині ДНК, оцінено середню відстань між цими протийонами вздовж подвійної спіралі. Середня мінімальна відстань між протийонами всередині подвійної спіралі становить біля 6 Å. Враховуючи, що діаметри протийонів металів, таких як Na^+ та K^+ , становлять приблизно 1,9 Å та 2,7 Å, відповідно, зауважимо, що така відстань між протийонами вздовж макромолекули не забезпечує максимального заповнення внутрішніх об'ємів подвійної спіралі ДНК. Таким чином, розроблена модель [31] описує загальні особливості структури іонної атмосфери навколо ДНК та здатна передбачити діапазон (мінімальне та максимальне значення) кількості протийонів, захоплених у жолобах подвійної спіралі.

3.4.4 Розподіл молекулярних протийонів навколо молекули ДНК

Важливим для ДНК видом протийонів є молекули природніх поліамінів, такі як спермідин³⁺ і спермін⁴⁺. Поліаміни присутні в клітині у мікромольних концентраціях і виконують важливу роль у компактизації ДНК в ядрі клітини. Конкуруючи з іншими протийонами, позитивно заряджені поліаміни сильно взаємодіють з негативно зарядженим остовом ДНК. Молекули поліамінів можуть з'єднувати дві або більше фосфатні групи, що належать до різних макромолекул ДНК. Ці електростатичні містки між різними сегментами ДНК дозволяють організувати та ущільнити геном, сприяти конденсації хромосом під час поділу клітини, а також утворення щільних конденсатів у ДНК-наноматеріалах. Особливістю молекул поліамінів є те, що ці молекули є видовженими і за рахунок торсійних кутів вони можуть приймати різні форми. У зв'язку з цим важливим є дослідження взаємозв'язку розподілу молекул поліамінів навколо ДНК та їх конформаційної гнучкості.

Для визначення характеру розподілу молекул поліамінів навколо подвійної спіралі ДНК та конформаційної гнучкості молекул поліамінів було виконано симуляцію низки систем ДНК з молекулами спермідину³⁺ [32,33]. В системах, що моделювалися, містилося одна та дві молекули ДНК довжиною 22 пари нуклеотидів з послідовністю CGCGAATTCGCGCGAATTCGCG. Концентрація молекул спермідину³⁺ забезпечувала повну нейтралізацію негативного заряду фосфатних груп ДНК, що є достатньою для індукування конденсації ДНК. Симуляції здійснювалися в рамках пакету програм GROMACS [34]. Силове поле – AMBER bsc1 [35].

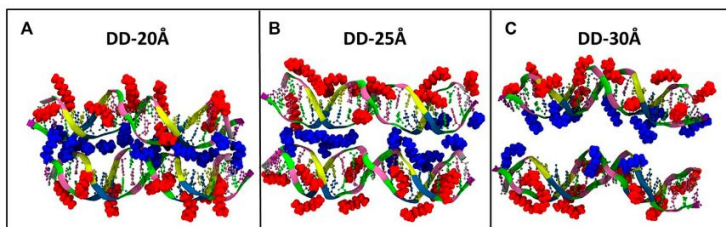


Рис. 3.4.6: Зображення вільних захоплених (синій колір) та не захоплених (червоний колір) молекул поліамінів у випадку систем із двома молекулами ДНК, що знаходяться на визначених відстанях між осями подвійної спіралі: 20, 25 і 30 Å [33].

Аналіз траєкторій моделювання систем ДНК з поліамінами показав, що всі молекули спермідину³⁺ взаємодіють з поверхнею ДНК, як у просторі між молекулами ДНК, так і в зовнішніх областях. В результаті усі молекули спермідину³⁺ було класифіковано як «захоплені» та «вільні» (Рис. 3.4.6). Вважалося, що молекула поліаміну є захопленою у просторі між ДНК, якщо відстань від центрального атома N спермідину³⁺ до центру принаймні однієї пари основ кожної молекули ДНК менша, ніж певна відстань (від 15 Å до 22 Å, залежно від системи).

В системі з відстанню між осями спіралей ДНК 20 Å (система DD – 20 Å) кількість захоплених молекул поліамінів досягає максимального значення – 13 молекул. Захоплена молекула спермідину³⁺ зазвичай залишається в пастці між молекулами ДНК майже без руху. У системі з відстанню осями спіралей ДНК 25 Å (система DD – 25 Å) після врівноваження спостерігається коливання кількості захоплених молекул поліамінів між 9–11 молекул. У цій системі, хоча є деякі заблоковані поліаміни, інші молекули спермідину³⁺ можуть переміщуватися від однієї молекули ДНК до іншої, з проміжним станом, що характеризується «місткоподібною» структурою. Якщо відстань між двома молекулами ДНК далі збільшується, кількість захоплених молекул спермідину³⁺ коливається ще більше від максимуму 14 молекул до мінімуму – 6 молекул. В цій системі всі поліаміни рухаються або вздовж однієї і тієї ж молекули ДНК, або від однієї молекули ДНК до іншої, утворюючи ті ж «місткоподібні» структури.

Таким чином, в рамках виконаного молекулярно-динамічного дослідження показано, що на взаємодію спермідину³⁺ з ДНК чітко впливає від-

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

стань між молекулами ДНК, при зменшенні відстані між двома негативно зарядженими подвійними спіралями призводить до збільшення концентрації спермідину³⁺ в обмеженій області та зменшення швидкості обміну молекул поліамінів між захопленим і вільним станами. В точках контакту між ДНК кілька молекул спермідину³⁺ приймають орієнтацію, в якій спермідин³⁺ паралельний остову однієї молекули ДНК і перпендикулярний остову другої молекули ДНК. Аміногрупи, що координують даний фосфат, часто належать до різних молекул спермідину³⁺, утворюючи складну мережу.

Дослідження процесу формування міжспіральних контактів за участі молекул поліамінів показало, що конформаційна гнучкість цих молекул має першочергове значення. Зокрема, молекула спермідину³⁺ є дуже гнучкою за рахунок семи торсійних кутів вздовж остова молекули. Для кожного торсійного кута існують три мінімуми енергії (транс, гош+ і гош-), що створює великий конформаційний простір спермідину³⁺. Однак, як показують експериментальні дані, різниця енергій між транс і гош-станами залежить від конкретного двогранного кута, причому для деяких з них є перевага транс-стану, а для інших – гош+/- [36]. У зв'язку з цим молекулярно-динамічне дослідження систем ДНК з спермідин³⁺ є надвичайно важливим для забезпечення детальної класифікації конформаційного ландшафту поліамінів.

В роботі [37] виконано систематичне дослідження конформаційних властивостей спермідину³⁺ у водному розчині, як за відсутності, так і за наявності подвійної спіралі ДНК з метою виявлення найбільш імовірних конформацій цього поліаміну. В рамках методу класичної молекулярної динаміки було змодельовано дві системи. Перша система складається з 15 молекул спермідину³⁺, нейтралізованих іонами хлориду, розчинених у водному розчині з KCl при концентрації 0,15 М. Друга система відрізняється від першої тим, що окрім 15 молекул спермідину³⁺ у водному розчині при концентрації 0,15 М KCl присутня подвійна спіраль ДНК з послідовністю нуклеотидів d(CGCGAATTCGCGCGAATTCGCG). Усі моделювання і симуляції проводилися за допомогою пакету програм GROMACS [34]. Силове поле – AMBER bsc1 [35].

Для виявлення найбільш імовірних конформаційних станів молекули спермідину³⁺ було проведено аналіз розподілу відстаней між кінцями молекули. У випадку довгих молекул середнє значення відстані між кінцями (EED) характеризує ступінь ущільнення молекули в розчині. У випадку відносно коротких молекул EED безпосередньо пов'язаний з конформа-

3.4. Моделювання властивостей ДНК з протійонами

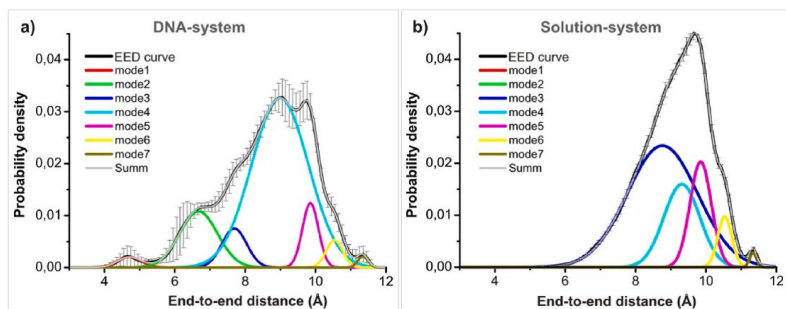


Рис. 3.4.7: Конформаційні спектри спермідину³⁺, що описують розподіл EED [37]. Спектри підбираються за допомогою 7 гаусоїд (мод). (а) Конформаційні спектри, усереднені по всіх молекулах спермідину³⁺ і всіх траєкторіях системи з ДНК. (б) Конформаційні спектри, усереднені по всіх молекулах спермідину³⁺ системи поліамінів в розчині.

ційним станом молекули, і в даній роботі він використовується для характеристики конформації спермідину³⁺. Розподіл EED названо конформаційним спектром.

Конформаційні спектри, усереднені за всіма поліамінами та за всіма траєкторіями моделювання для системи з ДНК показано на Рис. 3.4.7а, а спектри для системи поліамінів в розчині – на Рис. 3.4.7б. Для аналізу конформаційні спектри розкладалися за гаусовими кривими (модами). Всього використовувалося 7 гаусоїд, відповідно до кількості піків, які спостерігалися. Результати аналізу показали, що конформаційні спектри молекули спермідину³⁺ можна умовно розділити на три області: вигнуту (<7,3 Å), проміжну (від 7,3 Å до 10,2 Å) та розтягнуту (>10,2 Å). Вигнута область містить моди 1 і 2. Проміжна область складається з мод 3, 4 і 5. Розтягнута область містить моди 6 і 7.

Моди вигнутої області характеризуються короткими відстанями між кінцями молекули спермідину³⁺, для яких відштовхування між позитивно зарядженими атомами поліаміну найбільше. Тому моди 1 і 2 спостерігаються лише в системах з ДНК і характеризуються відносно низькою інтенсивністю в конформаційних спектрах, особливо мода 1 (Рис. 3.4.2). Взаємодії між позитивно зарядженими поліамінами та негативно зарядженими атомами остова подвійної спіралі стабілізують конформації мо-

лекул спермідину³⁺ у модах 1 і 2. Ці моди спостерігаються лише в системі з ДНК, тоді як у системі без ДНК їх немає. Моді 3, 4 і 5 присутні в конформаційних спектрах спермідину³⁺ обох змодельованих систем і є досить інтенсивними. Однак положення їх максимумів дещо відрізняються в двох системах. Така різниця пов'язана з різницею форми конформаційних спектрів поліаміну в системі з ДНК та без ДНК. Моді 6 і 7 утворюють розтягнуту область конформаційних спектрів спермідину³⁺. Положення 7 відповідає максимально розтягнутому стану молекули спермідину³⁺, де всі двогранні кути близькі до транс-конформації. Таким чином, встановлено сім різних конформаційних мод для спермідину³⁺: дві моди з'являються лише в системі з ДНК, а інші п'ять мод присутні в обох системах (Рис. 3.4.8).

Аналіз показав, що в той час як згинання молекули спермідину³⁺ обов'язково включає *транс-гош* конформаційний перехід деяких двогранних кутів молекулярного остова, внесок двогранних кутів є нерівномірним. Найбільш помітну роль у згинанні відіграють торсійні кути N-C-C-C. Інші двогранні кути, тобто C-N-C-C або C-C-C-C, переважно приймають транс-конформацію навіть для малих значень EED. Перевага транс-конформації для двогранного кута C-C-C-C молекули спермідину³⁺ у водному розчині ДНК узгоджується з даними ЯМР [36].

В роботі [38] окремо досліджено структуру та формування сильно вигнутої конформації молекули спермідину³⁺, яка утворюється при взаємодії з ДНК (мода 1). Аналіз показав, що формування моди 1 відбувається, коли молекули спермідину³⁺ локалізуються поблизу двох фосфатних груп різних тяжів подвійної спіралі ДНК (Рис. 3.4.9). Аміногрупи молекули поліаміну щільно оточують атоми кисню фосфатних груп, утворюючи тісні контакти при обертанні навколо них. У деяких випадках центральна частина поліаміну може розташовуватися глибоко у самій внутрішній ділянці мінорного жолобу, тоді як кінцеві аміногрупи координують один з атомів кисню фосфатних груп. Відстані між атомами кисню фосфатних груп у комплексі зі спермідином³⁺ можуть бути дуже малими (близько 3 Å). Типові відстані між атомами азоту спермідину³⁺ у разі аномальної вигнутої конформації моди 1 варіюються від 3 до 5 Å.

Сильно вигнуті конформації моди 1 молекули спермідину³⁺ виникають в результаті взаємодії атомів кисню OP1 фосфатних груп подвійної спіралі ДНК і аміногруп атомів азоту молекули поліаміну. Зазвичай ці щільні контакти одночасно залучають фосфати протилежних тяжів, як показано на Рис. 3.4.10а, де можна побачити, як молекулу поліаміну можна

3.4. Моделювання властивостей ДНК з протійонами

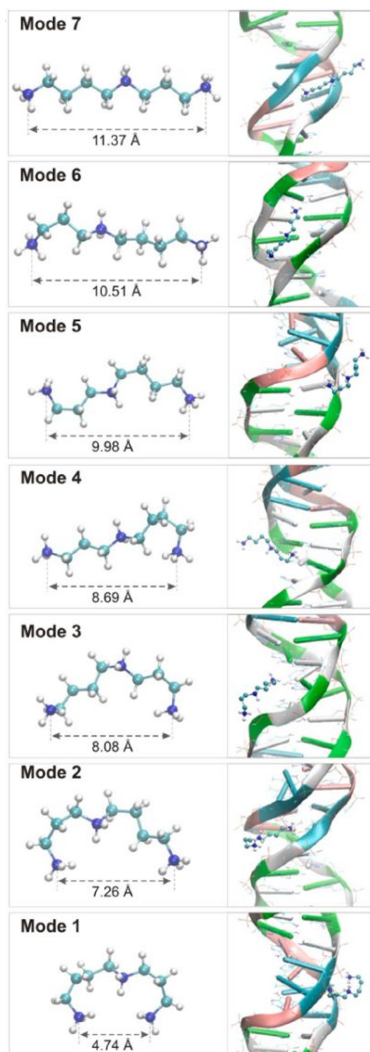


Рис. 3.4.8: Характерні знімки спермідину³⁺ у різних областях подвійної спіралі ДНК [37]. Конформаційні режими поліаміну показані ліворуч без урахування структури ДНК. Знімки форми спермідину³⁺ в різних областях подвійної спіралі ДНК показані праворуч.



Рис. 3.4.9: Знімки структури аномальної вигнутої конформації спермідину³⁺ з ДНК у випадку моди 1 [38]. Зліва та посередині показані моментальні знімки вигнутої молекули спермідину³⁺ з різних боків. Справа наведена структура вигнутої молекули спермідину³⁺ і контакти з атомами кисню фосфатних груп різних тяжів ДНК.

вважати розділеною на дві частини. Перша частина складається з атомів N1-C4-C5-C6-N2, які утворюють шестичленне кільце з атомом кисню OP1 однієї з фосфатних груп ДНК. Це можна вважати циклогексаноподібним кільцем (Рис. 3.4.10b). Друга частина складається з атомів N-C-C1-C2-C3-N1 спермідину³⁺, що утворюють семичленне кільце з атомом кисню OP1 фосфатної групи ДНК. Це кільце циклогептана (Рис. 3.4.10c).

Утворення таких кілець визначає конформаційну мінливість молекули поліаміну у моді 1. У разі циклогексаноподібного кільця атоми N1 та N2 мають обмежену рухливість через взаємодію з фосфатною групою ДНК. Атом C5 є найбільш рухомих через його часті переходи між двома можливими позаплощинними положеннями. Такі переходи аналогічні переходу крісло-ванна в циклогексані. Як відомо, циклогексанові кільця не є напруженим станом. У разі циклогептан-подібного кільця атоми N та N1 обмежені у своєму русі зв'язуванням з атомами кисню фосфатних груп ДНК. Навпаки, атоми C2 і C3 рухливі і здійснюють переходи між двома можливими позаплощинними положеннями. Ці переходи супроводжуються перевертанням двох кутів зі станів g_{oh}^+ до станів g_{oh}^- (Рис. 3.4.10), що призводить до конформацій кільця, аналогічним конформаціям крісла і твіст-крісла циклогептану.

У комплексі між аномально вигнутою молекулою спермідину³⁺ і ДНК центральна аміногрупа одночасно зв'язується з двома атомами кисню, що належать фосфатам у протилежних ланцюгах. В результаті ця аміногрупа більш обмежена порівняно з аміногрупами на кінцях молекули спермідину³⁺. Ці обмеження можуть впливати на рухливість найближчих

3.4. Моделювання властивостей ДНК з протийонами

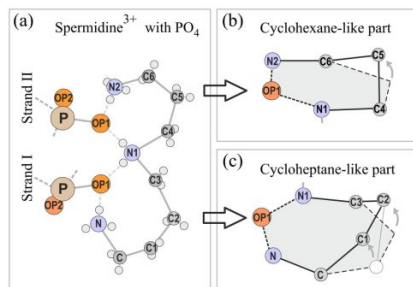


Рис. 3.4.10: Конформації молекули спермідину³⁺ в аномальному зігнутому стані (мода 1) [38]: (а) схематичне зображення комплексу між вигнутою молекулою спермідину³⁺ та атомами кисню фосфатних груп ДНК; (б) частина молекули спермідину³⁺ (N1-C4-C5-C6-N2), що утворює шестичленне кільце з атомом кисню OP1 фосфатної групи ДНК; (в) частина молекули спермідину³⁺ (N-C-C1-C2-C3-N1), що утворює семичленне кільце з атомом кисню OP1 фосфатної групи ДНК.

атомів C3 і C4. Внаслідок цього торсійний кут, що біля цього атома, завжди знаходиться переважно в *транс* станах.

3.4.5 Взаємодія молекул пероксиду водню з ДНК

Під час опромінення ракових клітин високоенергетичними іонними променями утворюється велика кількість молекул пероксиду водню (H_2O_2), які ефективно стримують розвиток ракових пухлин в організмі хворого. Незважаючи на інтенсивні дослідження в галузі іонної терапії онкологічних захворювань, механізм ефекту залишається невизначеним. Взаємодія молекули перекису водню (H_2O_2) з подвійною спіраллю ДНК представляє великий інтерес для розуміння механізмів протипухлинної терапії пучками важких іонів. Молекула H_2O_2 може зв'язуватися з ДНК специфічно через атоми нуклеотидних основ і неспецифічно через атоми кисню фосфатних груп остова макромолекули. У зв'язку з цим є важливим вивчення взаємодії молекул перекису водню зі структурними елементами подвійної спіралі ДНК. Реалістичне моделювання процесів взаємодії H_2O_2 з елементами структури ДНК повинно включати взаємодії з оточуючими молекулами води та іонами розчину, що може бути здійснено

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

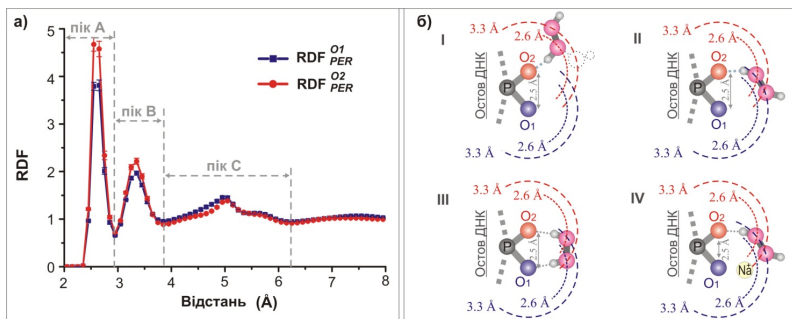


Рис. 3.4.11: Розподіл молекул пероксиду водню навколо фосфатних груп ДНК [39]: (а) усереднені функції радіального розподілу для атомів кисню молекул пероксиду водню відносно атомів кисню O₁ і O₂ фосфатних груп остова ДНК; (б) структурні схеми комплексів H₂O₂ з фосфатними групами основи подвійної спіралі ДНК. Штриховані лінії позначають відстані піку А та піку В функцій радіального розподілу. Молекули води не показані для ясності подання.

в рамках методу молекулярної динаміки. В рамках співробітництва між групами вчених, що в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України під керівництвом С.Н. Волкова і в Університеті імені Павла Йозефа Шафарика в Кошицях під керівництвом Йозефа Улічного, було проведено молекулярно-динамічне дослідження взаємодії молекул пероксиду водню з фосфатними групами остова подвійної спіралі ДНК [39]. Дослідження проводили для п'яти різних систем, три з яких містили молекулу ДНК, і дві системи були без ДНК. Подвійна спіраль ДНК знаходилася у В-формі і складалася з 20 пар основ, що повторювалися d(CGCGAATTCGCG}AATTCGCG). Системи з ДНК склалися з фрагмента подвійної спіралі, оточеного молекулами води, протийонів Na⁺ та молекул перекису водню різної концентрації. Концентрація молекул перекису водню в системах з ДНК становила 0 М, 0,3 М та 3,5 М H₂O₂, відповідно. Симуляції проводилися за допомогою програмного пакету NAMD [40] з використанням силового поля CHARMM36 [41,42].

Аналіз радіальних функцій розподілу (Рис. 3.4.11а) показав, що молекули H₂O₂ беруть участь у формуванні гідратної оболонки фосфатної групи остова ДНК. Зокрема, можливі чотири комплекси молекули H₂O₂

3.4. Моделювання властивостей ДНК з протийонами

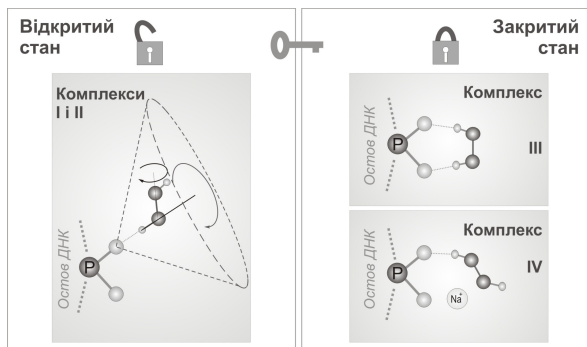


Рис. 3.4.12: Механізм утворення відкритого і закритого станів у комплексах молекули пероксиду водню з фосфатними групами остова подвійної спіралі ДНК.

та PO_4^- (Рис. 3.4.11б). Комплекс, де молекула перекису водню пов'язана з одним з атомів кисню фосфатної групи (O_1 або O_2) за допомогою одного Н-зв'язку (Комплекс I), виявився домінуючим. Молекула пероксиду водню в комплексі такого типу може здійснювати обертання навколо Н-зв'язку і не має жодних обмежень для конформаційних змін молекули. Водночас, комплекси, де молекула H_2O_2 пов'язана з фосфатною групою двома Н-зв'язками (Комплекс III) або Н-зв'язком та контактом, опосередкованим протийоном (Комплекс IV), характеризується фіксованими положеннями атомів кисню молекули пероксиду водню відносно атомів кисню фосфатної групи. Комплекси III та IV рідко спостерігались в симуляції. Беручи до уваги відносну рухливість молекули перекису водню в Комплексах I та II, їх можна вважати відкритим станом, тоді як у Комплексах III та IV через обмеження в рухомості H_2O_2 є випадками закритого стану (Рис. 3.4.12).

Взаємодіючи з фосфатною групою остова ДНК у випадку комплексів I та II, молекула перекису водню заміщує одну молекулу води, зв'язану з одним з атомів кисню фосфатної групи. У випадку комплексу III дві молекули H_2O витісняються з гідратаційної оболонки фосфатної групи і заміщаються однією молекулою H_2O_2 . Утворення комплексу IV відбувається завдяки наявності протийонів Na^+ з гідратаційною оболонкою, де дві молекули H_2O замінені однією молекулою H_2O_2 . Протийони з перекисом

водню в своїй гідратній оболонці, конденсуючись на макромолекулі ДНК, доставляють молекули H_2O_2 до подвійної спіралі. Молекула пероксиду водню поблизу ДНК може залишити гідратну оболонку іона або залишитися в ній, що дає можливість утворювати всі розглянуті комплекси.

Ймовірний вплив молекули H_2O_2 на біологічні механізми ДНК можна розглядати як багатоступеневий процес із подальшим утворенням комплексів відкритого та закритого стану (Рис. 3.4.12). Молекула пероксиду водню з розчину зв'язується з одним із атомів кисню фосфатної групи (O_1 або O_2), утворюючи комплекс відкритого стану (Комплекс I або II). Перебуваючи деякий час у такому стані, молекула H_2O_2 може дисоціювати від фосфатної групи назад у розчин або перейти до закритого стану (Комплекс III або IV). У комплексі закритого стану атоми фосфатної групи подвійної спіралі ДНК недоступні для утворення Н-зв'язку з іншими молекулами. Одночасно утворення двох водневих зв'язків з атомами ДНК є необхідним для розпізнавання нуклеїнових білків, отже зв'язування молекул перекису водню з фосфатними групами остова подвійної спіралі може індукувати вплив на біологічні процеси.

3.4.6 Підсумок

Досліджено структуру та динаміку іон-гідратної оболонки подвійної спіралі ДНК. Для визначення місця трансляційних коливань молекул води, що знаходяться у водному хребті мінорного жолоба ДНК, побудовано модель конформаційних коливань ДНК на основі підходу Волкова-Косевича. Показано, що моди коливань молекул води знаходяться в низькочастотному діапазоні спектру в околі від 165 до 210 см^{-1} і залежать від послідовності пар нуклеотидів. Розрахунки показали, що для цієї моди має бути суттєвим ізотопічний зсув у випадку заміни H_2O на D_2O , який складає приблизно 10 см^{-1} . Одержані результати можуть бути використані для експериментального виявлення коливань водного хребта мінорного жолоба подвійної спіралі ДНК.

В рамках молекулярно-динамічного моделювання досліджено структуру та динаміку іон-гідратної оболонки подвійної спіралі ДНК. Зокрема, для різних ділянок подвійної спіралі проаналізовано колективні коливання молекул води, що проявляються в низькочастотному діапазоні спектру ($<300 \text{ см}^{-1}$). Результати показали, що коливальна динаміка гідратної оболонки ДНК суттєво відрізняється від динаміки молекул води в об'ємі. Характерні моди коливань зміщуються приблизно на 20 см^{-1} у бік

3.4. Моделювання властивостей ДНК з протийонами

вищих частот, а мода симетричного розтягування водневих зв'язків поблизу 150 см^{-1} зникає внаслідок взаємодії з атомами подвійної спіралі ДНК. Отримані результати можуть дати інтерпретацію експериментальних даних низькочастотних спектрів ДНК і можуть бути важливими для розуміння процесів непрямого білково-нуклеїнового впізнання.

Для визначення розподілу сконденсованих протийонів між внутрішніми та зовнішніми ділянками ДНК розвинуто спеціальну модель на основі теорії конденсації Менніга. Результати показали, що кількість протийонів, захоплених усередині макромолекули, має бути більшою за 0,16 на одну фосфатну групу. Максимальна кількість протийонів, які можуть бути локалізовані всередині подвійної спіралі ДНК, обмежена і становить приблизно 0,4 на одну фосфатну групу, що набагато менше, ніж загальна кількість сконденсованих протийонів. Одержані оцінки узгоджуються з результатами виконаних молекулярно-динамічних симуляцій. Розроблена модель описує загальні особливості структури хмари протийонів навколо ДНК та дозволяє передбачити їх кількість усередині жолобів подвійної спіралі.

Проведено молекулярно-динамічне дослідження для систем, що містять дві макромолекули ДНК з молекулами спермідину³⁺. Показано, що динаміка поліамінів сильно залежить від відстані, що розділяє різні макромолекули ДНК: на малій відстані (біля 20 \AA) молекули спермідину³⁺ в міжспіральной області ефективно зв'язуються з ДНК, а на великій – вони стають більш мобільними і переміщуються від одного місця зв'язування до іншого. В областях ДНК-ДНК контактів молекули спермідину³⁺ утворюють поперечні зшивки. Виявлено, що молекули спермідину³⁺ локалізуються переважно у мінорному жолобі подвійної спіралі ДНК на ділянках з нуклеотидними послідовностями ААТТ та АТАТ, що вказує на можливість контролюваного формування міжспіральных зшивок.

Подальші дослідження комплексів спермідину³⁺ з подвійною спіраллю ДНК здійснювалися у напрямку визначення ролі конформаційної гнучкості поліамінів. Досліджено конформаційний простір спермідину³⁺ на основі атомістичного моделювання методом молекулярної динаміки. Аналізуючи розподіл відстаней між кінцями молекул поліаміну, усі її можливі 2187 конформацій було об'єднано в 7 різних сімейств. Число конформаційних сімейств відповідає числу торсійних кутів в остові поліаміну і є однаковим як у водному розчині, так і при взаємодії з подвійною спіраллю ДНК. Однак присутність ДНК сильно впливає на ймовірність кожної конформації. Зокрема, компактні конформації, які дуже рід-

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

ко зустрічаються в розчині, стають суттєвими в системі з ДНК. Показано, що аномально вигнуті конформації молекули спермідину³⁺ є результатом взаємодії всіх трьох аміногруп поліаміну з фосфатними групами ДНК з боку мінорного жолоба подвійної спіралі. Зміни торсійних кутів зігнутої молекули спермідину³⁺ пояснено з погляду конформаційних перетворень шести- і семичленних кілець, аналогічних циклогексану і циклогептану. Аналіз розташування молекул спермідину³⁺ вздовж макромолекули ДНК виявив специфічність послідовності нуклеотидів з вираженою перевагою А-трактів з боку мінорного жолоба. Утворення аномально вигнутих конформацій спермідину³⁺ у комплексі з подвійною спіраллю ДНК може мати першорядне значення для розуміння механізмів, що лежать в основі біологічного функціонування ДНК.

Окреме моделювання було виконано для вивчення конкурентного зв'язування молекул пероксиду водню та води з фосфатними групами остова подвійної спіралі ДНК. Результати молекулярно-динамічних симуляцій для ДНК у водному розчині з молекулами пероксиду водню та протійонами Na⁺ показали, що молекули пероксиду водню зв'язуються з фосфатними групами ДНК, замінюючи молекули води з гідратної оболонки. Аналіз можливих структур, які можуть утворювати молекула H₂O₂ у комплексі з фосфатною групою ДНК, виявив, що найімовірнішими є комплекси, в яких молекула перекису водню пов'язана з фосфатною групою одним водневим зв'язком. Комплекси, в яких молекула H₂O₂ пов'язана з фосфатною групою двома водневими зв'язками, або за допомогою Н-зв'язку та іонно-опосередкованого контакту, спостерігалися рідко. Слід очікувати, що молекули перекису водню можуть пригнічувати утворення водневих зв'язків з фосфатними групами остова подвійної спіралі, порушуючи біологічне функціонування ДНК.

Автор висловлює подяку своїм колегам, разом з якими виконувалися дослідження та здійснювалося обговорення результатів: С.Н. Волкову (ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України), Тетяні Бубон (ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України), О.О. Здоревському (Університет Гельсінкі, Фінляндія), Д.В. П'ятницькому (ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України), Tudor Vasiliu (Інститут макромолекулярної хімії «Петру Поні», Яси, Румунія), Leon Engelbrecht (Університет Кальярі, Сардинія, Італія), Aatto Laaksonen (Стокгольмський Університет, Швеція), Francesca Mocchi (Університет Кальярі, Сардинія, Італія), Jozef Uličný (Університет ім. П.Й. Шафарика в Кошиці, Словаччина), Giuseppe Brancato (Національний інститут ядерної фізики INFN, Піза, Італія).

Бібліографія

1. J.D. Watson and F.H.C. Crick, *Nature* **171**, 737 (1953).
2. H.R. Wilkins, M.H.F. Stokes, A.R. and Wilson, *Nature* **171**, 738 (1953).
3. R.E. Franklin and R.G. Gosling, *Nature* **171**, 740 (1953).
4. S. Perepelytsya, D. Piatnytskyi, T. Bubon, N. Cibotariu, A. Laaksonen, and F. Mocchi, *Small Structures* **7**, e202500786 (2026).
5. E. Chargaff, E., Magasanik, B., Doniger, R. and Vischer, J. *Am. Chem. Soc.* **71**, 1513 (1949).
6. C. Chargaff, E., Zamenhof, S. and Green, *Nature* **165**, 756 (1950).
7. N.C. Seeman, *Nature* **421**, 427 (2003).
8. W. Saenger, *Principles of Nucleic Acid Structure* (Springer New York, New York, NY, 1984).
9. J.A.L. Roodhuizen, P.J.T.M. Hendrikx, P.A.J. Hilbers, T.F.A. De Greef, and A.J. Markvoort, *ACS Nano* **13**, 10798 (2019).
10. E. Duboué-dijon, A.C. Fogarty, J.T. Hynes, and D. Laage, *J Am Chem Soc* **1**, 1 (2016).
11. D. Laage, T. Elsaesser, and J.T. Hynes, *Chemical Reviews* **117**, 10694 (2017).
12. R.E. Franklin and R.G. Gosling, *Acta Crystallographica* **6**, 673 (1953).
13. В.Я. Малеев, М.А. Семенов, А.И. Гасан, and В.А. Кашпур, *Биофизика* **38**, 768 (1993).
14. Ю.П. Благой, О.Н. Веселков, С.Н. Волков, Д.М. Говорун, М.П. Євстєрнеєв, Р.О. Жураківський, О.І. Корнеюк, В.Я. Малеев, М.О. Семенов, В.О. Сорокін, В.М. Харкянєн, Л.М. Христофоров, and А.В. Шестопалова, *Принципи Молекулярної Організації і Структурної Динаміки Біополімерів* (Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, 2011).
15. C. Mao, W. Sun, Z. Shen, and N.C. Seeman, *Nature* **397**, 144 (1999).

16. J. Kondo, Y. Tada, T. Dairaku, Y. Hattori, H. Saneyoshi, A. Ono, and Y. Tanaka, *Nature Chemistry* **9**, 956 (2017).
17. S.B. Mitta, R. Harpalsinh, J. Kim, H.S. Park, and S.H. Um, *Advanced Materials Interfaces* **9**, (2022).
18. S.B. Mitta, J. Kim, H.H. Rana, S. Kokkiligadda, Y.T. Lim, S.H. Bhang, H.S. Park, and S.H. Um, *PNAS Nexus* **3**, pgae213 (2024).
19. H.K.E. Landenmark, D.H. Forgan, and C.S. Cockell, *PLoS Biol* **13**, e1002168 (2015).
20. H.R. Drew and R.E. Dickerson, *Journal of Molecular Biology* **151**, 535 (1981).
21. V.P. Denisov, G. Carlström, K. Venu, and B. Halle, *Journal of Molecular Biology* **268**, 118 (1997).
22. Bubon, T.L., Perepelytsya, S.M., *European Physical Journal E* **44**, 84 (2021).
23. S.N. Volkov and A.M. Kosevich, *J. Biomolec. Struct. Dyn.* **8**, 1069 (1991).
24. S. Perepelytsya, *Journal of Molecular Modeling* **24**, 171 (2018).
25. L.A. Bulavin, S.N. Volkov, S.Yu. Kutovy, and S.M. Perepelytsya, *Reports of the National Academy of Sciences of Ukraine* (2007).
26. T. Bubon, O. Zdorevskyi, and S. Perepelytsya, *European Biophysics Journal* **52**, 69 (2023).
27. T. Bubon and K. Azizi, *J. Phys. Chem. B* **129**, 28 (2025).
28. F. Oosawa, *Polyelectrolytes* (Marcel Dekker. Inc., New York, 1971).
29. G.S. Manning, *Quarterly Reviews of Biophysics* **11**, 179 (1978).
30. R. Das, T.T. Mills, L.W. Kwok, G.S. Maskel, I.S. Millett, S. Doniach, K.D. Finkelstein, D. Herschlag, and L. Pollack, *Physical Review Letters* **90**, 4 (2003).
31. S. Perepelytsya and O. Zdorevskyi, *Low Temperature Physics* **48**, 293 (2022).
32. F. Mocchi, A. Laaksonen, L. Engelbrecht, T. Vasiliu, and S. Perepelytsya, in *Soft Matter Systems for Biomedical Applications. Springer Proceedings in Physics, Vol 266* (Springer, Cham., 2022), pp. 163–192.

33. T. Vasiliu, F. Mocci, A. Laaksonen, L.D.V. Engelbrecht, and S.M. Perepelytsya, *Frontiers in Chemistry* **10**, 836994 (2022).
34. M.J. Abraham, T. Murtola, R. Schulz, S. Páll, J.C. Smith, B. Hess, and E. Lindahl, *SoftwareX* **1–2**, 19 (2015).
35. I. Ivani, P.D. Dans, A. Noy, A. Pérez, I. Faustino, A. Hospital, J. Walther, P. Andrio, R. Goñi, A. Balaceanu, G. Portella, F. Battistini, J.L. Gelpí, C. González, M. Vendruscolo, C.A. Laughton, S.A. Harris, D.A. Case, and M. Orozco, *Nature Methods* **13**, 55 (2016).
36. K. Maruyoshi, K. Nonaka, T. Sagane, T. Demura, T. Yamaguchi, N. Matsumori, T. Oishi, and M. Murata, *Chemistry A European Journal* **15**, 1618 (2009).
37. S. Perepelytsya, T. Vasiliu, A. Laaksonen, L. Engelbrecht, G. Brancato, and F. Mocci, *Journal of Molecular Liquids* (2023).
38. S. Perepelytsya, T. Vasiliu, A. Laaksonen, L.D.V. Engelbrecht, and F. Mocci, *Low Temperature Physics* **50**, 204 (2024).
39. S. Perepelytsya, J. Улішні́, and S.N. Volkov, *Eur Biophys J* **50**, 759 (2021).
40. J.C. Phillips, R. Braun, W. Wang, J. Gumbart, E. Tajkhorshid, E. Villa, C. Chipot, R.D. Skeel, L. Kalé, and K. Schulten, *Journal of Computational Chemistry* **26**, 1781 (2005).
41. A.D. MacKerell and N.K. Banavali, *Journal of Computational Chemistry* **21**, 105 (2000).
42. N. Foloppe and A.D. MacKerell, *Journal of Computational Chemistry* **21**, 86 (2000).

3.5 Вплив топології складногалужених Гаусових макромолекул на їх поведінку в розчинах

В. Блавацька

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1,
e-mail: viktorija@icmp.lviv.ua

Властивості полімерних розчинів суттєво визначаються розміром та формою типових конформацій окремих макромолекул, які в свою чергу є залежними від топології структури цих молекул. Розглянуто приклади складногалужених полімерних структур та кількісно описано особливості їх конформаційних характеристик розміру та форми, застосовуючи як аналітичний, так і чисельний підходи.

3.5.1 Вступ

Характеристики розміру та форми типових конформацій, які набувають полімерні макромолекули у розчинах, значною мірою визначають, зокрема, динаміку згортання та каталітичну активність [1] білків, гідродинаміку полімерних рідин [2] тощо. Було запропоновано [3, 4] характеризувати просторову асиметрію типових полімерних конфігурацій за допомогою обертально-інваріантних універсальних величин, таких як усереднена асферичність $\langle A_d \rangle$ (тут і далі $\langle \dots \rangle$ позначає усереднення по ансамблю всіх можливих полімерних конфігурацій). Величина $\langle A_d \rangle$ набуває максимального значення одиниці для повністю розтягнутої стрижнеподібної конфігурації, та нуля у випадку ідеальної сферичної форми. Як характеристику ефективного розміру (ефективне видовження в просторі) окремої полімерної макромолекули, можна розглянути усереднений радіус гірації $\langle R_g^2 \rangle$, який безпосередньо вимірюється в експериментах зі статичного розсіювання. Зауважимо, що надалі нас цікавитимуть лише Гаусові полімерні структури, де нехтується само- та взаємоунікаючими взаємодіями між мономерами, що характерно для випадку так званого θ -розчину. В такому наближенні, зокрема для лінійного полімерного ланцюжка при $d = 3$ значення асферичності $A_{3\text{chain}} = 0.394274$ [5].

Вплив топології окремих полімерних макромолекул на їхні статичні та динамічні властивості в розчинниках є питанням, що викликає великий

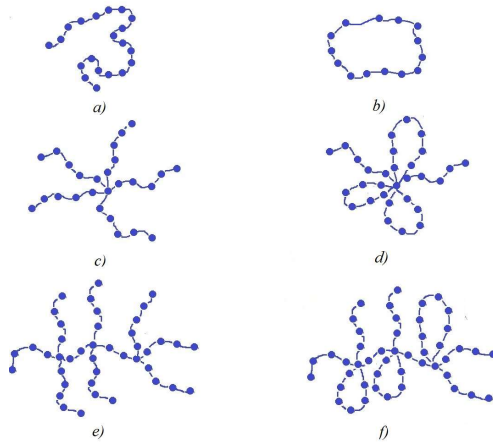


Рис. 3.5.1: Схематичне представлення типових топологій полімерів: а) лінійна, б) петлева, в) зірка з $f=5$ гілками, д) розетка з $f_c=2$ лінійними гілками та $f_r=3$ петлями, е) щітковий полімер з $n=3$ точками розгалуження, кожна з яких містить $f_c=2$ лінійних гілок, ф) щітковий полімер з $n=3$ точками розгалуження, кожна з яких містить $f_c=1$ лінійних гілок та $f_r=1$ петель.

інтерес у сучасній фізиці полімерів. Для порівняння ефективних розмірів будь-якої складної полімерної топології $\langle R_g^2 \rangle_{\text{complex}}$ та одиночного полімерного ланцюжка $\langle R_g^2 \rangle_{\text{chain}}$ такої ж сумарної молекулярної маси вводиться співвідношення розмірів [6]:

$$g = \frac{\langle R_g^2 \rangle_{\text{network}}}{\langle R_g^2 \rangle_{\text{chain}}}. \quad (3.5.1)$$

Починаючи з фундаментальних робіт Цімма та Штокмайєра [6], було проведено теоретичний аналіз найпростішого представника нетривіальної розгалуженої топології макромолекул, так званого зіркоподібного полімеру (див. Рис. 3.5.1с) з f лінійними гілками, що розходяться від центральної точки розгалуження. Для співвідношення розмірів у цьому випадку знайдено точний вираз

$$g_{\text{star}} = \frac{3f - 2}{f^2}, \quad (3.5.2)$$

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

та оцінено збільшення симетрії форми із зростанням f (наприклад, $A_{3\text{star}}(f = 12) = 0.089$ [7]). Конформаційні властивості розміру та форми зіркоподібних полімерів нещодавно були ретельно досліджено в роботі [8] із застосуванням як аналітичних, так і числових підходів.

Встановлено, що багато синтетичних полімерів утворюють кільцеві структури (Рис. 3.5.1b) під час полімеризації та поліконденсації [9]. У цьому відношенні цікавими є так звані розеткові полімери [10], що містять f_c лінійних гілок та f_r замкнених петель (петлюсток), що розходяться з однієї точки розгалуження (рис. 3.5.1d). При $f_r = 0$ відновлюється f_c -розгалужений зіркоподібний полімер. Вплив такої гібридної топології на конформаційні властивості було проаналізовано в роботах [11, 12]. З постійним прогресом у синтезі та аналізі полімерів, з часом було синтезовано макромолекули з набагато складнішою архітектурою та властивостями. Найпростішим випадком полімерної архітектури з більш ніж однією точкою розгалуження, який досить точно вловлює реологічні властивості комерційних розплавів довголанцюгових галужених полімерів, є структура «пом-пом» [13], що складається з лінійного основного ланцюга з двома кінцевими точками розгалуження функціональних груп f_1 та f_2 , відповідно. Як аналітичні, так і числові дослідження, присвячені властивостям розміру та форми таких молекулярних топологій, були проведені в роботах [14–16]. Як наступний крок до ускладнення структури, слід згадати щіткоподібні полімери (рис. 3.5.1e), як важливих представників класу складнорозгалужених структур. Вони характеризуються набором f_c бічних лінійних ланцюжків (гілок), періодично приєднаних у n точках розгалуження до лінійного полімерного остова [17] (зауважимо, що при $n = 2$ відновлюється так званий симетричний помпом з $f_1 = f_2 = f_c + 1$). Випадок щіткоподібних топологій, що містять не лише лінійні бічні ланцюжки, а й гілки у формі замкнених петель у кожній точці розгалуження (Рис. 3.5.1f) розглядався у роботі [18].

Складні полімерні мережі великої молекулярної маси з множинними центрами галуження є цікавими об'єктами для вивчення як з академічної [20], так і з комерційної [21] точки зору. На мові математичних графів, точки розгалуження в полімерних мережах розглядаються як вершини (вузли), і їх функціональність, таким чином, визначає кількість вихідних зв'язків (ступенів) цих вузлів. У роботах [22, 23] було запропоновано модель безмасштабної полімерної мережі, де ступені вузлів k підпорядковуються степеневому розподілу:

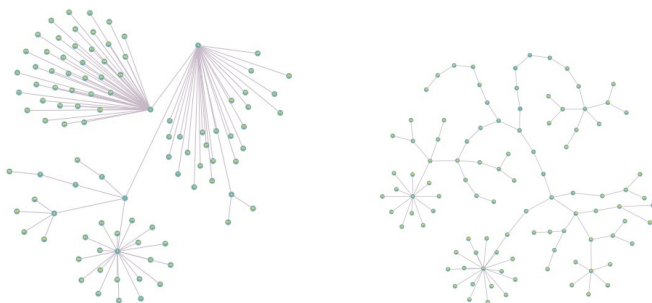


Рис. 3.5.2: Безмасштабні мережі з $N = 100$ мономерів та показником $\alpha = 2.1$ (ліворуч) та $\alpha = 3.5$ (праворуч), побудовані на основі алгоритму безмасштабного дендримера (SFD) з $k_{\min} = 1$ (більш детально у Підрозділі 3.5.4).

$$p(k) \sim k^{-\alpha}, \quad k \gg 1. \quad (3.5.3)$$

Нещодавно, у роботі [19] кількісно описано збільшення компактності та симетрії таких мережевих структур (зображених на Рис. 3.5.2, 3.5.3) зі зменшенням параметра α .

Структура решти розділу така. У наступному підрозділі коротко описано два методи, що успішно застосовувались для аналізу конформаційних властивостей Гаусових полімерів складної структури: аналітичний

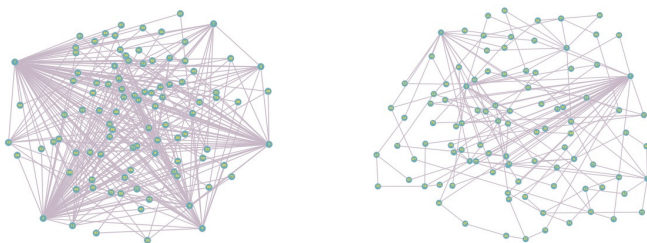


Рис. 3.5.3: Безмасштабні мережі з $N = 100$ мономерів та показником $\alpha = 2.1$ (ліворуч) та $\alpha = 3.5$ (праворуч), побудовані на основі алгоритму конфігураційної безмасштабної мережі із $k_{\min} = 2$ [19] (більш детально у Підрозділі 3.5.4).

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

підхід інтегрування за траєкторіями та чисельний метод Вея. У підрозділі 3.5.3 наведено результати розрахунку параметрів розмірів та форми шіткоподібних полімерних структур, а підрозділ 3.5.4 присвячено полімерним структурам у формі Гаусових безмасштабних мереж. Завершуємо розділ, наводячи Висновки та коротке обговорення.

3.5.2 Методи

Серед різноманітних аналітичних та числових підходів, що застосовуються для кількісного опису конформаційних властивостей полімерів у розчинниках, тут зосередимося на двох із них. Аналітичний підхід, що дозволяє отримати точні значення універсальних конформаційних характеристик розміру та форми Гаусових полімерних структур, базується на моделі безперервного ланцюжка, запропонованій Едвардсом [24], яка тісно пов'язана з інтегруванням за траєкторіями у квантовій механіці [25]. Цей підхід дозволив отримати точні значення низки характеристик розміру та форми складних полімерних топологій, таких як розеткові [10], шіткоподібні [18], сніжинкоподібні [16] полімерні структури, випадкові полімерні мережі [26] тощо. Однак слід зазначити, що він стикається з серйозними технічними труднощами із зростанням складності архітектури полімерів. У цьому відношенні дуже потужним виявляється чисельний метод Вея [27, 28], який дозволяє отримати високоточні оцінки конформаційних характеристик полімерної структури будь-якої топології у Гаусовому наближенні. Цей метод визначає форму гаусової мережі з N вершин через її $N \times N$ матрицю Кірхгофа \mathbf{K} . Вона визначається як $\mathbf{K} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$, де \mathbf{D} – матриця степенів, а \mathbf{A} – матриця суміжності. Таким чином, діагональні елементи K_{ii} дорівнюють степеню вершини i , тоді як недіагональні елементи K_{ij} дорівнюють -1 , коли вершини i та j суміжні, та 0 в іншому випадку. Метод Вея було успішно застосовано для оцінки значень форми набору складних полімерних структур, таких як гребінчасті полімери [28], дендримери [29], шіткоподібні структури [18], полімерні мережі Erdős-Rényi [26] тощо.

3.5.3 Шіткові полімерні структури

Конформаційні характеристики шіткових полімерних структур із n точками розгалуження на лінійному ланцюжку-основі, кожна з яких містить f_c бічних лінійних ланцюжків та f_r замкнених кілець (Рис. 3.5.1f),

3.5. Вплив топології складногалужених Гаусових макромолекул

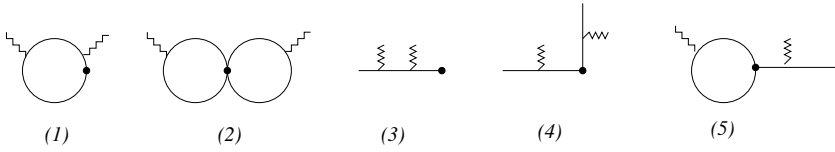


Рис. 3.5.4: Діаграмне представлення внесків у $\langle R_g^2 \rangle$. Суцільна лінія на діаграмі є схематичним представленням полімерної траєкторії довжиною S , а хвилясті лінії позначають точки s_1 та s_2 , \bullet позначає положення точки галуження.

було досліджено в рамках аналітичного підходу на основі моделі неперервного ланцюжка у роботі [18].

На мові моделі Едвардса, статистична сума такої системи визначається як:

$$Z_{\text{bottlebrush}} = \int \mathcal{D}\vec{r} \prod_{k=1}^{n+1} \delta(\vec{r}_k(L_b) - r_{k+1}(0)) \times \\ \times \prod_{i=1}^{f_c+f_r} \delta(\vec{r}_i(L) - \vec{r}_i(0)) \prod_{j=1}^{f_r} \delta(\vec{r}_j(L) - \vec{r}_j(0)) \prod_{i=1}^{f_c+f_r} e^{-H_i}. \quad (3.5.4)$$

Тут H_i позначає Гамільтоніан, що співвідноситься з кожною i -ю траєкторією довжиною S_i та параметризованою радіус-вектором $\vec{r}_i(s)$, із $0 \leq s \leq S_i$, згідно з

$$H_i = \frac{1}{2} \int_0^{S_i} \left(\frac{d\vec{r}_i(s)}{ds} \right)^2, \quad (3.5.5)$$

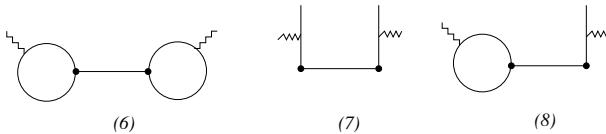


Рис. 3.5.5: Діаграмне представлення внесків у $\langle R_g^2 \rangle$. Позначення такі ж як на Рис. 3.5.4, за винятком того що довжина центральної лінії тут позначає (змінну) кількість сегментів ланцюжка-основи, позначеної як p .

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

перший набір δ -функцій описує основу, яка складається з n сегментів, причому кожен наступний сегмент починається з кінця попереднього. Другий та третій набори δ -функцій означають, що кожна з точок розгладження служить початковою точкою для $f_c + f_r$ вихідних траєкторій. Обмежимося лише випадком, коли всі бічні ланцюжки мають однакову довжину $S_i = S$, проте сегменти основи мають різну довжину S_b , так що $(S_b/S) = a$. У цьому випадку загальна довжина основи становить $(n+1)S_b$. Загальна кількість траєкторій для цієї структури становить, відповідно, $F = 1 + n(f_c + f_r + 1)$. У рамках цієї моделі, вираз для радіуса гірації означається як:

$$\langle R_g^2 \rangle = \frac{1}{2(FL)^2} \sum_{i,j=1}^F \int_0^L \int_0^L \langle (\vec{r}_i(s_2) - \vec{r}_j(s_2))^2 \rangle. \quad (3.5.6)$$

При його обчисленні використовується діаграмна техніка (Рис. 3.5.4, 3.5.5). Застосовуючи загальні правила діаграмних обчислень та зібравши отримані внески від різних діаграм, отримується вираз для відношення розмірів [18]:

$$\begin{aligned} g_{bb} &= \left[a(a^2 + (2f_c + f_r)a + (f_r + f_c)^2)n^3 + (2a^3 + (2f_c + f_r)a^2 \right. \\ &+ (12f_c + 2f_r)a + 12 \left(\frac{f_r^3}{3} + f_c^2 + \frac{4f_c f_r}{3} \right) \left. \right) n^2 \\ &+ (12a^3 + (4f_c + 2f_r)a^2 - (4f_c^2 - (8f_r - 12)f_c - 4f_r^2 + 2f_r)a \\ &- 8f_c - f_r)n + 4a^3 \left. \right] [(f_c + f_r)n + (a + 1)n]^{-3}. \end{aligned} \quad (3.5.8)$$

При $f_r = 0$, відтворюється результат для щіткового полімеру, що містить лише лінійні гілки, із роботи [30]. Важливо відзначити, що при будь-якому n значення g менше за одиницю, що відображає зменшення ефективного розміру полімерної структури порівняно з лінійним ланцюжком. Цей ефект зростає зі збільшенням n . Крім того, наявність бічних петель, у свою чергу, призводить до зменшення ефективного розміру розглянутих структур порівняно з ефектом, спричиненим лінійними бічними ланцюгами.

3.5.4 Безмасштабні полімерні мережі

Звернімося до значно складніших полімерних структур із неоднорідним розподілом ступенів вузлів, що описується виразом (3.5.3) і аналізувались

у роботі [19]. На цьому етапі можна побудувати дві суттєво різні топології з різними характеристиками, хоча вони керуються одним і тим самим розподілом ступенів вузлів (3.5.3).

Перша схема базується на застосуванні алгоритму конфігураційної моделі (SFC) [31], де стартується з набору N незв'язаних вузлів зі ступенями, відповідно, k_i ($i = 1, \dots, N$), які є випадковими числами, взятими з розподілу ймовірностей (3.5.3) з умовою $k_{\min} \leq k_i \leq k_{\max}$, де k_{\min} та k_{\max} є мінімальним та максимальним ступенями вузлів. У даному випадку обрано $k_{\min} = 2$. Випадковим чином вузли з'єднуються, враховуючи їхні ступені (кількість можливих вихідних зв'язків) k_i (Рис. 3.5.3). Істотною особливістю мереж, створених на основі такого алгоритму, є те, що вони містять ряд множинних петель та загалом мають кругову структуру.

У рамках другої схеми метою є отримання безмасштабної мережі без внутрішніх петель, що нагадують узагальнені дендримерні структури. Такий алгоритм безмасштабної дендримерної мережі (SFD) був розроблений у роботах [22, 23]. В рамках цього алгоритму стартується з одиночного вузла зі ступенем k_1 , вибраного випадковим чином із розподілу (3.5.3) з умовою $k_{\min} = 2$. Множина k_1 вузлів надалі з'єднується з кожним із його вихідних зв'язків. Процедура триває, доки не досягнуто бажаної загальної кількості вузлів N . На цьому етапі зростання мережі зупиняється, і всім решті відкритих вершин присвоюється ступінь $k = 1$. Приклади мереж, отриманих на основі цього алгоритму, представлені на рис. 3.5.2, вони мають топологію, що нагадує ієрархічні структури дендримерів, за винятком

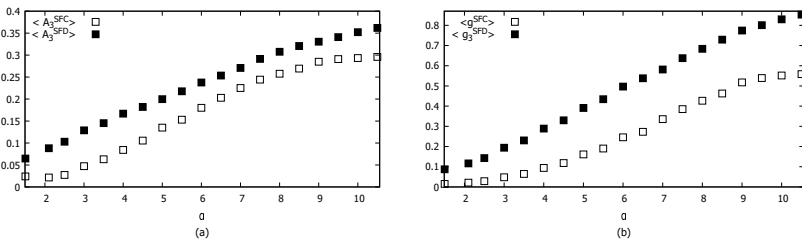


Рис. 3.5.6: Асферичності $\langle A_3 \rangle$ (а) та співвідношення розмірів $\langle g \rangle$ (б) полімерних безмасштабних мереж із фіксованим $N = 100$ та різними α , отримані в числових симуляціях із застосуванням методу Вея. Відкриті символи: алгоритм SFC; заповнені символи: алгоритм SFD [19].

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

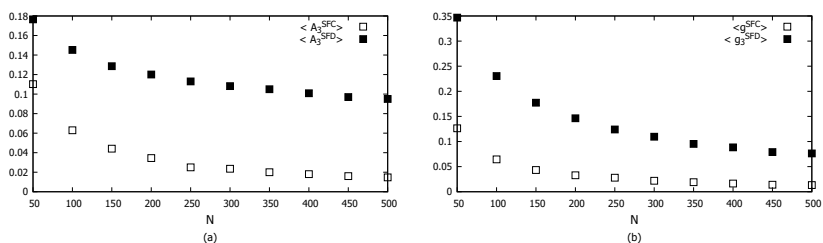


Рис. 3.5.7: Середні значення асферичності $\langle A_3 \rangle$ (а) та співвідношення розмірів $\langle g \rangle$ (б) полімерних безмасштабних мереж із фіксованим $\alpha = 3.5$ та різними N , отримані в числових симуляціях із застосуванням методу Вея. Відкриті символи: алгоритм SFC; заповнені символи: алгоритм SFD [19].

того, що кожна точка розгалуження тут містить випадкову галуженість згідно (3.5.3).

Оцінки для спостережуваних величин, а саме характеристики розміру та форми обох типів структур, отримані шляхом побудови ансамблів мереж застосовуючи як схеми SFC, так і SFD. Результати для $\langle A_3 \rangle$ та $\langle g \rangle$, отримані шляхом застосування формул Вея та виконання усереднення, представлені на Рис. 3.5.6, 3.5.7. Обидва значення зростають із параметром α , що вказує на зменшення ролі вузлів із високим ступенем, тоді як при будь-якому α структури SFD є більш анізотропними та протяжними порівняно з мережами, побудованими за SFC. Зауважимо, що для достатньо високих α мережі SFC поступово набувають структури замкненого полімерного кільця, тоді як мережа SFD досягає межі лінійного полімерного ланцюга. Для цих випадків відтворюються відомі значення $A_{3\text{chain}} = 0.394274$ [5], $A_{3\text{ring}} = 0.246368$ [5], $g_{\text{ring}} = 1/2$ [6].

3.5.5 Висновки

Цей огляд присвячено впливу топології складних Гаусових полімерних структур на їх характеристики розміру та форми, що є суттєвими в контексті динаміки згортання макромолекул та гідродинаміки полімерних рідин. Зокрема, основний інтерес представляли обертально-інваріантні універсальні величини, такі як усереднена асферичність $\langle A_d \rangle$ (міра відхилення типової конформації полімеру від ідеалізованої сферичної форми)

та співвідношення розмірів g (міра просторової протяжності складної макромолекули порівняно з окремим лінійним ланцюжком). Ми зосередилися на двох потужних та добре перевірених методах, успішно застосованих для кількісного опису конформаційних властивостей Гаусових полімерів у розчинниках. Перший із них базується на моделі безперервного ланцюжка, що дозволяє отримувати точні результати для Гаусових полімерних структур, але стикається з технічними обмеженнями зі збільшенням складності архітектури полімерної мережі. На противагу цьому, метод Вея застосовний для аналізу макромолекул будь-якої (складної) топології, якщо означено їх матрицю Кірхгофа та її власні значення. Кількісно показано зростання компактності та симетрії щіткоподібних полімерних макромолекул, що містять f_c лінійних ланцюжків та f_r петель у кожній із n точок галуження вздовж ланцюжка-основи [18]. Оцінено характеристики розміру та форми безмасштабних полімерних мереж [19], розподіл ступенів вузлів у яких підлягає степеневому закону (3.5.3), та кількісно вказано збільшення компактності та симетрії таких мережевих структур зі зменшенням параметра α .

Бібліографія

1. K. Plaxco, K.T. Simons, and D. Baker, *J. Mol. Biol.* **277**, 985 (1998).
2. J. de la Torre, O. Llorca, J. L. Carrascosa, and J. M. Valpuesta, *European Biophys. J.* **30**, 457 (2001).
3. J.A. Aronovitz and D.R. Nelson. *J. de Physique* **47**, 1445 (1986).
4. J. Rudnick and G. Gaspari. *J. Phys. A: Math. and Gen.* **19**, L191 (1986).
5. G. Wei and X. Zhu, *Physica A* **237**, 423 (1997).
6. B. H. Zimm and W.H. Stockmayer, *J. Chem. Phys.* **17**, 1301 (1949).
7. G. Wei, *Macromolecules* **30**, 2130 (1997).
8. O. Kalyuzhnyi, K. Haidukivska, V. Blavatska, and Ja. Pnytskyi, *Macromol. Theory and Simul.* **28**, 1900012 (2019).
9. J. Roovers and P. M. Toporowski, *Macromolecules* **16**, 843 (1983).
10. V. Blavatska and R. Metzler, *J. Physics A: Math. and Theor.* **48**, 135001 (2015)

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

11. K. Haydukivska, V. Blavatska, and Ja. Paturej, *Scientific Reports* **10**, 14127 (2020).
12. K. Haydukivska and V. Blavatska, *Phys. Rev. E* **97**, 032502 (2018).
13. G. Bishko, T. C. B. McLeish, O. G. Harlen, and R. G. Larson, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2352 (1997).
14. K. Haydukivska, O. Kalyuzhnyi, V. Blavatska, and Ja. Ilnytskyi, *J. Mol. Liq.* **328**, 115456 (2021)
15. K. Haydukivska, O. Kalyuzhnyi, V. Blavatska, and J. Ilnytskyi, *Condens. Matter Phys.* **25**, 23302 (2022).
16. K. Haydukivska and V. Blavatska, *Condens. Matter Phys.* **26**, 23301 (2023).
17. S. Sheiko, B. S. Sumerlin, and K. Matyjaszewski, *Progress in Polym. Sci.* **33** 759, (2008).
18. K. Haydukivska and V. Blavatska, *J. Phys. A: Math. and Theor.* **55**, 145001 (2022).
19. V. Blavatska and Yu. Holovatch, *J. Phys.: Cond. Matt.* **37**, 145101 (2025).
20. B. Duplantier, *J. Stat. Phys.* **54**, 581 (1989).
21. Y. Gu, Ju. Zhao, and J. A. Johnson, *Angewandte Chemie International Edition* **59** 5022, (2020).
22. M. Galiceanu, A. S. Reis, and M. Dolgushev, *J. Chem. Phys.* **141**, 14 (2014).
23. M. Galiceanu, *Phys. Rev. E* **86**, 4 (2012).
24. S.F. Edwards, *Proc. Phys. Soc.* **85**, 613 (1965).
25. J. des Cloizeaux and G. Jannink, *Polymers in Solution: their modelling and structure*. (Clarendon Press: Oxford, 1991).
26. V. Blavatska, K. Haydukivska, and Yu. Holovatch, *J. Phys: Cond. Matt.* **32**, 335102 (2020).
27. G. Wei, *Physica A: Stat. Mech. and Appl.* **222**, 155 (1995).

28. Ch. von Ferber, M. Bishop, T. Forzaglia, C. Reid, and G. Zajac, *J. Chem. Phys.* **142**, 024901 (2015).
29. R. de Regt, Ch. von Ferber, M. Bishop, and T. Hamling, *Physica A: Stat. Mech. and its Applications* **516**, 50 (2019).
30. Y. Nakamura, Yu. Wan, J. W. Mays, H. Iatrou, and N. Hadjichristidis, *Macromolecules* **33**, 8323 (2000).
31. M. Molloy and B. Reed, *Random Structures and Algorithms* **6**, 161 (1995).
32. S. Caracciolo, A. J. Guttmann, I. Jensen, A. Pelissetto, A. N. Rogers, and A. D. Sokal, *J. Stat. Phys.* **120**, 1037 (2005).

3.6 Фармакологічні особливості 4-тіазолідинонів як перспективних біологічно активних сполук

А.В. Лозинський, І.В. Коваленко, Р.Б. Лесик

ДНП «Львівський національний медичний університет
імені Данила Галицького»

3.6.1 Вступ

4-Тіазолідинони як джерело потенційних лікарських засобів залишаються об'єктом підвищеної уваги фармацевтичної науки ще з початку ХХ століття. Для цього класу гетероциклічних сполук історично характерні антимікробна, фунгістатична та противірусна активності [1–5]. Подальший розвиток медичної хімії та значний прогрес у біологічному скринінгу, зокрема впровадження високопродуктивних фармакологічних методів оцінки, дозволили переосмислити фармакологічний потенціал цієї групи гетероциклів. Було виявлено низку несподіваних біологічних ефектів, що зумовило появу принципово нового класу антидіабетичних препаратів та відкрило перспективи застосування 4-тіазолідинонів у терапії соціально значущих захворювань, зокрема онкологічних, серцево-судинних патологій та запальних процесів.

У даному фрагменті роботи проведено узагальнення сучасних даних щодо фармакології 4-тіазолідинонів та їх функціональних похідних із метою об'єктивної оцінки їхнього потенціалу як платформи для розробки нових лікарських засобів. Відомо, що один із найпростіших представників цього класу — 2,4-тіазолідиндіон — рекомендований як профілактичний засіб проти дії іонізуючого випромінювання [6], що додатково підтверджує доцільність використання цього гетероциклічного каркасу в раціональному дизайні біологічно активних молекул. Модифікація структури 4-тіазолідинонів значно розширює спектр їх фармакологічної активності, причому критичне значення має введення різноманітних структурних фрагментів (ариліденових, гетериліденових, алкільних, енамінових тощо) у положення 5 базового циклу [7]. У даному короткому повідомленні охарактеризовано деякі види біологічної активності зазначеного класу сполук: протидіабетичну, протимікробну та протитрипаносомну.

3.6.2 Протидіабетична активність 5-заміщених 4-тіазолідинонів

Протягом останніх десятиліть однією з головних проблем клінічної фармакології залишається пошук ефективних засобів для лікування цукрового діабету 2 типу. Значний внесок у становлення тіазолідинонів як нового класу протидіабетичних агентів зробили дослідники фармацевтичних компаній Takeda Pharmaceutical Company та Sankyo Co., Ltd.

У 1982 році фахівці Takeda описали серію 5-(4-*R*-бензил)-2,4-тіазолідинонів, здатних знижувати інсулінорезистентність і підвищувати біологічну дію інсуліну в експериментальних моделях діабету. Перший представник цієї групи — Ciglitazone — продемонстрував зниження рівнів глюкози, плазмового інсуліну та тригліцеридів у інсулін-резистентних тварин, водночас не проявляючи активності у здорових тварин і в моделі стрептозототин-індукованого діабету [8]. Подальші дослідження призвели до відкриття нових гіпоглікемічних тіазолідинонів (рис. 3.6.1), що остаточно сформувало концепцію фармакотерапії інсулінонезалежного діабету на основі підвищення чутливості тканин до інсуліну. У 1997 ро-

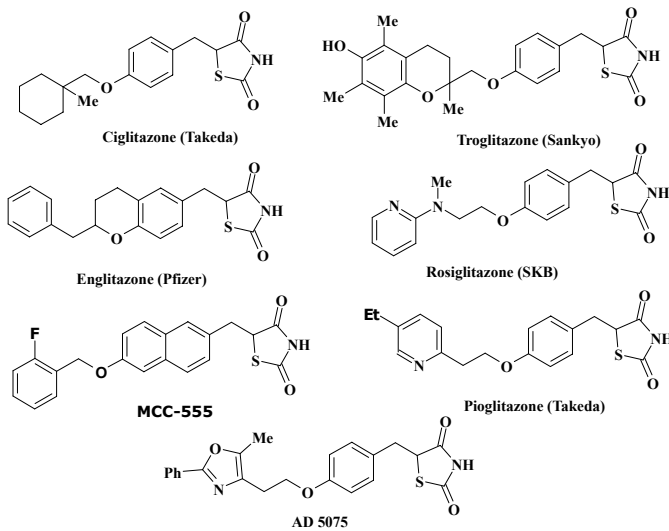


Рис. 3.6.1: Гіпоглікемічні засоби з групи 2,4-тіазолідинонів.

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

ці компанія Sankyo вивела на фармацевтичні ринки Японії та США препарат Troglitazone. Ще раніше, у 1996 році, Takeda запровадила в клінічну практику Японії, а згодом і США, Pioglitazone [9].

Препарат Rosiglitazone, розроблений компанією SmithKline Beecham, отримав схвалення для клінічного застосування у США. Інші представники класу — Englitazone (Pfizer), G1262570 (Glaxo Wellcome), JTT-501 (JT) та MCC-555 (Mitsubishi) — проходили II фазу клінічних досліджень. У 2003 році розіглітазон під торговою назвою Avandia був упроваджений на фармацевтичний ринок України [10].

Троглітазон та його структурні аналоги реалізували принципово новий підхід до лікування інсулінорезистентності, який не спрямований на стимуляцію секреції інсуліну, а на підвищення чутливості периферичних тканин до ендogenous гормону, що забезпечує зменшення інсулінорезистентності.

Молекулярний механізм дії тiazолідиндіонів пов'язують з активацією ядерних рецепторів Peroxisome proliferator-activated receptor gamma (PPAR γ) [11–14], які регулюють експресію генів, залучених до вуглеводного та ліпідного обміну. Подальше вивчення родини PPAR-рецепторів розширило уявлення про потенційні терапевтичні можливості цього класу сполук, зокрема у профілактиці та лікуванні серцево-судинних та онкологічних захворювань. Зокрема, перспективним напрямом є дослідження їхнього впливу на патологічну гіпертрофію міокарда.

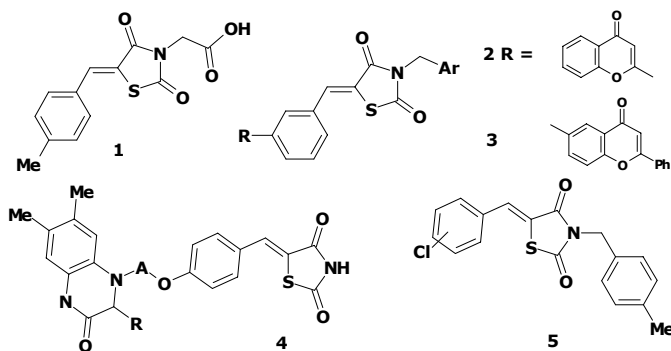


Рис. 3.6.2: 5-Ен-4-тіазолідинони як потенційні протидіабетичні лікарські засоби.

3.6. Фармакологічні особливості 4-тіазолідинонів

Важливо відзначити, що більшість глітазонів вміщують насичені фрагменти у положенні 5 базового гетероциклу, тоді 5-ен-похідні є активаторами PPAR-рецепторів в меншій мірі [11–14]. У той же час введення залишку карбонової кислоти в положення N3 та 5-енового фрагменту приводить до зниження гепатотоксичності (сполука 1). Крім того, похідне 2 та його похідні за відсутності активності щодо PPAR мають високу антидіабетичну активність *in vivo*. Це вказує на інший механізм протидіабетичної дії 5-ариліден-4-тіазолідинонів. 5-Ариліден-3-бензил-2,4-тіазолідиндіони 3 (рис. 3.6.2), структурно споріднені 5-ен-2,4-тіазолідиндіони 4 з об'ємними фрагментами у положенні C5 і більш прості аналоги 5 також розглядаються як потенційні гіполіпідемічні засоби.

5-Бензиліден-2,4-тіазолідиндіони 6 (рис. 3.6.3) розглядаються як перспективний клас інгібіторів α -глюкозидази (Alpha-glucosidase). α -Глюкозидаза (α -D-глюкозидглюкогідролаза) відноситься до мембраннозв'язаних екзоферментів, відповідальних за завершальний етап гідролітичного розщеплення вуглеводів у травному тракті [15]. Блокування активності цього ферменту призводить до уповільнення всмоктування глюкози та зменшення постпрандіальної гіперглікемії, що обґрунтовує потенціал таких сполук у фармакологічній корекції цукрового діабету.

Похідні тіазолідиндіону 7, що містять у положенні 5 2,3-дигідробензо[1,4]діоксиновий фрагмент, проявили виражену інгібувальну активність щодо глікогенфосфорилази (Glucogen phosphorylase) [16]. Цей фермент є ключовим у процесі глікогенолізу, регулюючи мобілізацію глюкози з депонованого глікогену та підтримку її концентрації в крові. Тому його інгібування вважається ефективним підходом для контролю рівня глюкози при цукровому діабеті 2 типу.

Відомо, що виникнення ранніх та пізніх ускладнень цукрового діабету, в значній мірі пов'язане з активацією мінорних шляхів перетворення глюкози, зокрема поліольного — за участю альдозоредуктази (AP).

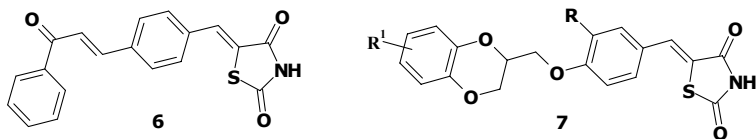


Рис. 3.6.3: 5-Ариліден-2,4-тіазолідинони як ефективні інгібітори α -глюкозидази та глікогенфосфорилази.

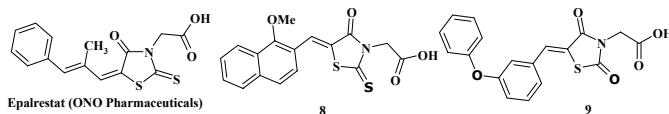


Рис. 3.6.4: Похідні 4-тіазолідинонів — інгібітори альдозоредуктази.

Серед інгібіторів альдозоредуктази (АР-інгібітори, рис. 3.6.4) необхідно виділити предстаника групи роданін-3-алканкарбонових кислот *Epalrestat* (ONO-2235, *Kinedak*, *Sorbistat*). *Epalrestat* впроваджений у 1982 році компанією ONO Pharmaceuticals [17]. За останні десятиліття відкрито серії високоселективних АР-інгібіторів серед 5-ариліденроданін-3-алканкарбонових кислот **8**. Аналогічну активність також проявляють структурно подібні похідні 2,4-тіазолідиндіонів **9**. Так, 2,4-діоксо-5-(нафтилметиліден)-3-тіазолідиноцтові кислоти інгібують альдозоредуктазу, проте їх дія дещо нижча, ніж у відповідних 2-тіоксоаналогів **8** [18].

3.6.3 Антимікробна, протигрибкова та протитрипаносомна активності

Одним із ключових і добре вивчених видів біологічної активності похідних тіазолідинону/тіазолу та їх структурних аналогів є протибактеріальна та протигрибкова дія [19,20]. На рівні із рядом протимікробних лікарських засобів, охарактеризованих на перших сторінках даного розділу, є ідентифікована велика кількість сполук, які мають високу біологічну активність та встановлені біомішені, через які реалізується дана фармакологічна дія. Зокрема, серед похідних на основі 5-бензиліден-2-тіоксотіазолідин-4-ону **10,11** було ідентифіковано високоактивні інгібітори UDP N-ацетилмурамат/1-аланін-лігази, ензиму, який відповідає за синтез компонентів клітинної стінки бактерій. Варто відзначити, що дані сполуки проявляли також високу активність проти грам-позитивного метацилінрезистентного *Staphylococcus aureus* MRSA, проте слабку дію щодо грамнегативної палички *Escherichia coli*. У статті *Grant E. B.* та співавторів було повідомлено про 5-(2-оксоіндолін-3-іліден)-2-тіоксотіазолідин-4-он **11** як сполуку, яка володіє високою інгібувальною активністю проти β-лактамази класу C [21]. Серед похідних на основі роданіну, було також ідентифіковано похідне **12** з високими показниками інгібування металоб-лактамази, що було повідомлено *Brem J.* та співавторами [22].

3.6. Фармакологічні особливості 4-тіазолідинонів

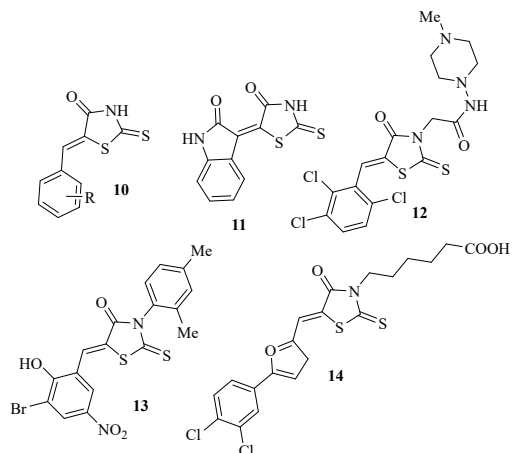


Рис. 3.6.5: Похідні на основі тіазолідинону з протимікробною активністю.

У роботі *Suree N.* та співавторів було ідентифіковано похідне 5-ариліден-3-фенілроданіну **13**, яке проявило високу інгібувальну активність проти сортази A [23]. Фактор вірулентності, сортаза A (SrtA), відіграє вирішальну роль у патогенезі грампозитивних бактерій. SrtA — мембранний фермент бактеріальної клітини, що закріплює важливі фактори вірулентності на поверхні клітинної стінки грампозитивних бактерій.

Новий клас інгібіторів пептиддеформілази (PDF), що базуються на основі 5-іліден-2-тіоксо-тіазолідин-4-ону із бічним ланцюгом гексанової кислоти в 3-положенні базового ядра (сполука **14**), було ідентифіковано двома паралельними підходами, а саме високопродуктивним та віртуальним скринінгом лігандів, що було вперше повідомлено *Howard, M. H.* та співавторами (рис. 3.6.5) [24].

Серед тіазоло-хінолінових гібридних молекул **15** було також ідентифіковано ряд високоактивних протимікробних агентів щодо *S. aureus* та *E. coli*, які володіли здатністю до інгування дегідрофлат редуктази (DHFR). Також серед похідних тіазолу з фрагментом індолін-2-ону було ідентифіковано також високоактивні інгібітори DHFR, зокрема сполука **16**, яка окрім того проявляла виражений ефект проти антибіотикорезистентної *P. aeruginosa*. Варто відзначити, що DHFR є ключовим ферментом у регуляції стільникових пулів тетрагідрофолієвої кислоти та її похі-

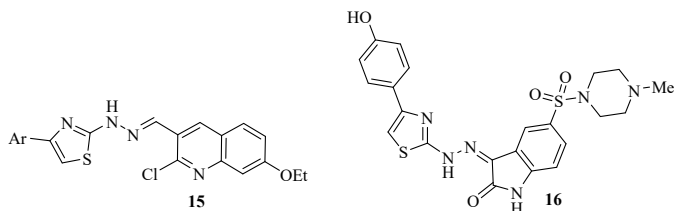


Рис. 3.6.6: Похідні тіазолу з протимікробною активністю.

дних (рис. 3.6.6). Окрім того даний ензим забезпечує процеси метилювання деоксиуридинмонофосфату до дезцитимідинмонофосфату, які забезпечують подальший клітинний ріст та проліферацію бактеріальних клітин [25,26].

Конденсовані похідні тіазолу проявляють також помітну протимікробну активність (рис. 3.6.7). Так, у ряді похідних тіазоло[4,5-*b*]хіноксаліну було ідентифіковано похідне 17, яке володіло здатністю інгібувати ДНК-гіразу *S. aureus*. Серед похідних тіазоло[3,2-*a*]піримідину було ідентифіковано похідне 18, що володіє високими інгібувальними властивостями циклодифосфат синтази (IspF) збудників *Mycobacterium tuberculosis* та *Plasmodium falciparum*. Варто відзначити, що фермент IspF є ключовим у регуляції немевалонатного шляху біосинтезу ізопреноїдів, що є клінічно підтвердженою біомішенню для лікування малярії. Окрім того, метаболічний шлях є також важливий у рості багатьох патогенних бактерій, включно з *Mycobacterium tuberculosis* [27] (рис. 3.6.7).

Антирипаносомний потенціал похідних тіазолідинону привертає значну увагу дослідників у зв'язку з необхідністю створення нових ефективних засобів для лікування африканського трипаносомозу та подола-

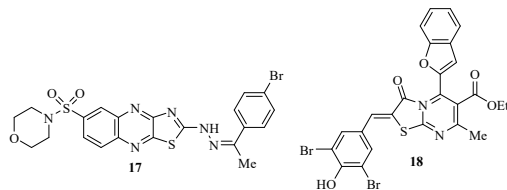


Рис. 3.6.7: Конденсовані похідні тіазолу з протимікробною активністю.

3.6. Фармакологічні особливості 4-тіазолідинів

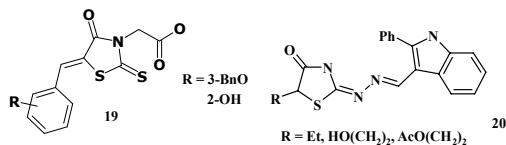


Рис. 3.6.8: DPMS-інгібітори як потенційні протитрипаносомні агенти.

ння проблеми резистентності збудника до існуючих препаратів. Однією зі стратегій розробки антитрипаносомних агентів є дизайн нових молекул на основі 5-ен-4-тіазолідинів, для яких валідовано відповідні біологічні мішені. Зокрема встановлено, що похідні 5-бензиліденроданін-3-оцтової кислоти **19** впливають на *Trypanosoma brucei* шляхом інгібування активності доліхолфосфатманозосинтетази (DPMS), яка відіграє критичну роль у біосинтезі глікокон'югатів *T. brucei*. Показано, що інгібітори DPMS блокують біосинтез глікозилфосфатидилінозитолу (GPI) та здатні знищувати навіть життєздатні форми трипаносом. Найвищу трипаноцидну активність ($ED_{50} \approx 100$ мкМ) продемонстрували 3-бензилоксизаміщений аналог, 2-гідроксипохідне, а також похідні 2-індолілгідразиноно-4-тіазолідинону [28,29,30] (рис. 3.6.8).

Серед похідних спіро-тіопірано[2,3-*d*]тіазолу **21** було виявлено активну сполуку, що інгібує ріст *Trypanosoma brucei brucei* та *Trypanosoma brucei gambiense* (збудника африканського трипаносомозу) зі значеннями IC_{50} 0,26 мкМ та 0,42 мкМ відповідно [31]. Цікавим є також встановлення подвійного ефекту — протилейкемічного ($\log GI_{50} = -5,16; -5,59$) та трипаноцидного для цієї сполуки. Такі результати можуть бути використані для з'ясування молекулярних механізмів дії зазначеного класу гетероциклів (рис. 3.6.9) [31].

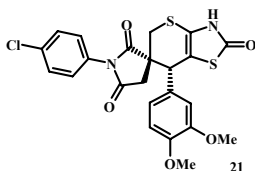


Рис. 3.6.9: Конденсовані похідні тіазолу з антитрипаносомною активністю.

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

Отже, похідні 5-ен-4-тіазолідинону та їх функціональні похідні є перспективною молекулярною платформою для створення нових біологічно активних сполук із широким спектром фармакологічної дії. Модифікація структури базового гетероциклу, зокрема введення 5-енових фрагментів і функціоналізація положення N3, дозволяє цілеспрямовано впливати на різні біомішені, що зумовлює їхній потенціал як протидіабетичних, протимікробних і протитрипаносомних агентів. Сукупність наведених даних підтверджує доцільність подальших досліджень цього класу сполук у контексті раціонального дизайну інноваційних лікарських засобів.

Бібліографія

1. Manjal, S. K., Kaur, R., Bhatia, R., Kumar, K., Singh, V., Shankar, R., Kaur, R. & Rawal, R. K. (2017). Synthetic and medicinal perspective of thiazolidinones: A review. *Bioorganic Chemistry*, 75, 406–423.
2. Nirwan, S., Chahal, V., & Kakkar, R. (2019). Thiazolidinones: Synthesis, reactivity, and their biological applications. *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 56(4), 1239–1253.
3. Brown, F. C. (1961). 4-Thiazolidinones. *Chemical Reviews*, 61(5), 463–521.
4. Aqlan, F. M., Al-Bogami, A. S., Alqahtani, N. F., Wani, M. Y., & Khan, S. A. (2022). Thiazolidinone: A structural motif of great synthetic and biological importance. *Journal of Molecular Structure*, 1250, 131771.
5. Lesyk, R. B., & Zimenkovsky, B. S. (2004). 4-Thiazolidinones: centenarian history, current status and perspectives for modern organic and medicinal chemistry. *Current Organic Chemistry*, 8(16), 1547–1577.
6. Verma, A., & Saraf, S. K. (2008). 4-Thiazolidinone—A biologically active scaffold. *European journal of medicinal chemistry*, 43(5), 897–905.
7. Kaminsky, D., Kryshchshyn, A., & Lesyk, R. (2017). 5-Ene-4-thiazolidinones—An efficient tool in medicinal chemistry. *European journal of medicinal chemistry*, 140, 542–594.
8. Zingarelli, B., Sheehan, M., Hake, P. W., O'Connor, M., Denenberg, A., & Cook, J. A. (2003). Peroxisome proliferator activator receptor- γ ligands, 15-deoxy- Δ 12, 14-prostaglandin J2 and ciglitazone, reduce systemic

- inflammation in polymicrobial sepsis by modulation of signal transduction pathways. *The Journal of Immunology*, **171**(12), 6827–6837.
9. Yokoi, T. (2009). Troglitazone. *Adverse Drug Reactions*, 419–435.
 10. Sevillano, J., López-Pérez, I. C., Herrera, E., del Pilar Ramos, M., & Bocos, C. (2005). Englitazone administration to late pregnant rats produces delayed body growth and insulin resistance in their fetuses and neonates. *Biochemical Journal*, **389**(3), 913–918.
 11. Kaleniuk, E., Holota, S., Skóra, B., Khylyuk, D., Tabęcka-Łonczyńska, A., Lesyk, R., & Szychowski, K. A. (2024). Anticancer properties of peroxisome proliferator-activated receptor gamma (PPAR γ) potential agonists 4-thiazolidinone-pyrazoline hybrids les-4368 and les-4370 in colorectal adenocarcinoma cells in vitro. *Applied Sciences*, **14**(17), 7692.
 12. Bar, M., Skóra, B., Tabęcka-Łonczyńska, A., Holota, S., Khylyuk, D., Roman, O., ... & Szychowski, K. A. (2022). New 4-thiazolidinone-based molecules Les-2769 and Les-3266 as possible PPAR γ modulators. *Bioorganic Chemistry*, **128**, 106075.
 13. Szychowski, K. A., Leja, M. L., Kaminsky, D. V., Kryshchshyn, A. P., Binduga, U. E., Pinyazhko, R., ... & Gmiński, J. (2017). Anticancer properties of 4-thiazolidinone derivatives depend on peroxisome proliferator-activated receptor gamma (PPAR γ). *European Journal of Medicinal Chemistry*, **141**, 162–168.
 14. Szychowski, K. A., Skóra, B., Kryshchshyn-Dylevych, A., Kaminsky, D., Khylyuk, D., & Lesyk, R. (2021). 4-thiazolidinone-based derivatives rosiglitazone and pioglitazone affect the expression of antioxidant enzymes in different human cell lines. *Biomedicine & Pharmacotherapy*, **139**, 111684.
 15. Khan, S., Iqbal, T., Chinnam, S., Alzahrani, E., Gomha, S. M., Zaki, M. E., ... & Kashtoh, H. (2025). Synthesis, in vitro and kinetic study of thiazolidinone derivatives: insight from a network medicinal approach for thymidine phosphorylase and alpha glucosidase. *Future Medicinal Chemistry*, **17**(21), 2573–2582.
 16. Czifrák, K., Páhi, A., Deák, S., Kiss-Szikszai, A., Kövér, K. E., Docsa, T., ... & Somsak, L. (2014). Glucopyranosylidene-spiro-iminothiazolidinone, a

- new bicyclic ring system: Synthesis, derivatization, and evaluation for inhibition of glycogen phosphorylase by enzyme kinetic and crystallographic methods. *Bioorganic & medicinal chemistry*, 22(15), 4028–4041.
17. Ramirez, M. A., & Borja, N. L. (2008). Epalrestat: an aldose reductase inhibitor for the treatment of diabetic neuropathy. *Pharmacotherapy: The Journal of Human Pharmacology and Drug Therapy*, 28(5), 646–655.
18. Reddy, T. N., Ravinder, M., Bagul, P., Ravikanti, K., Bagul, C., Nanubolu, J. B., ... & Rao, V. J. (2014). Synthesis and biological evaluation of new epalrestat analogues as aldose reductase inhibitors (ARIs). *European journal of medicinal chemistry*, 71, 53–66.
19. Garnaik, B., & Dash, S. (2014). Recent advances and potential antimicrobial activities of thiazolidinone derivatives: a review. *Asian Journal of Research in Chemistry*, 7(4), 446.
20. Khamitova, A., Berillo, D., Lozynskyi, A., Konechnyi, Y., Mural, D., Georgiyants, V., & Lesyk, R. (2024). Thiadiazole and thiazole derivatives as potential antimicrobial agents. *Mini Reviews in Medicinal Chemistry*, 24(5), 531–545.
21. Grant, E. B., Guiadeen, D., Baum, E. Z., Folenno, B. D., Jin, H., Montenegro, D. A., ... & Hlasta, D. J. (2000). The synthesis and SAR of rhodanines as novel class C β -lactamase inhibitors. *Bioorganic & medicinal chemistry letters*, 10(19), 2179–2182.
22. Brem, J., Van Berkel, S. S., Aik, W., Rydzik, A. M., Avison, M. B., Pettinati, I., ... & Schofield, C. J. (2014). Rhodanine hydrolysis leads to potent thioenolate mediated metallo- β -lactamase inhibition. *Nature chemistry*, 6(12), 1084–1090.
23. Suree, N., Yi, S. W., Thieu, W., Marohn, M., Damoiseaux, R., Chan, A., ... & Clubb, R. T. (2009). Discovery and structure–activity relationship analysis of Staphylococcus aureus sortase A inhibitors. *Bioorganic & medicinal chemistry*, 17(20), 7174–7185.
24. Howard, M. H., Cenizal, T., Gutteridge, S., Hanna, W. S., Tao, Y., Totrov, M., ... & Zheng, Y. J. (2004). A novel class of inhibitors of peptide deformylase discovered through high-throughput screening and virtual ligand screening. *Journal of medicinal chemistry*, 47(27), 6669–6672.

25. Ammar, Y. A., Abd El-Hafez, S. M., Hessein, S. A., Ali, A. M., Askar, A. A., & Ragab, A. (2021). One-pot strategy for thiazole tethered 7-ethoxy quinoline hybrids: Synthesis and potential antimicrobial agents as dihydrofolate reductase (DHFR) inhibitors with molecular docking study. *Journal of Molecular Structure*, **1242**, 130748.
26. Alzahrani, A. Y., Ammar, Y. A., Abu-Elghait, M., Salem, M. A., Assiri, M. A., Ali, T. E., & Ragab, A. (2022). Development of novel indolin-2-one derivative incorporating thiazole moiety as DHFR and quorum sensing inhibitors: Synthesis, antimicrobial, and antibiofilm activities with molecular modelling study. *Bioorganic Chemistry*, **119**, 105571.
27. Geist, J. G., Lauw, S., Illarionova, V., Illarionov, B., Fischer, M., Gräwert, T., ... & Diederich, F. (2010). Thiazolopyrimidine inhibitors of 2-methylerythritol 2, 4-cyclodiphosphate synthase (IspF) from *Mycobacterium tuberculosis* and *Plasmodium falciparum*. *ChemMedChem*, **5**(7), 1092–1101.
28. Holota, S., Kryshchyslyn, A., Derkach, H., Trufin, Y., Demchuk, I., Gzella, A., ... & Lesyk, R. (2019). Synthesis of 5-enamine-4-thiazolidinone derivatives with trypanocidal and anticancer activity. *Bioorganic chemistry*, **86**, 126–136.
29. Kryshchyslyn, A., Kaminsky, D., Karpenko, O., Gzella, A., Grellier, P., & Lesyk, R. (2019). Thiazolidinone/thiazole based hybrids — New class of antitrypanosomal agents. *European Journal of Medicinal Chemistry*, **174**, 292–308.
30. Kryshchyslyn, A., Kaminsky, D., Nektegayev, I., Grellier, P., & Lesyk, R. (2018). *Isothiochromenthiazoles* — A class of fused thiazolidinone derivatives with established anticancer activity that inhibits growth of *Trypanosoma brucei brucei*. *Scientia Pharmaceutica*, **86**(4), 47.
31. Zelisko, N., Atamanyuk, D., Vasylenko, O., Grellier, P., & Lesyk, R. (2012). Synthesis and antitrypanosomal activity of new 6, 6, 7-trisubstituted thiopyrano[2, 3-d][1,3]thiazoles. *Bioorganic & medicinal chemistry letters*, **22**(23), 7071–7074.

3.7 Застосування комп'ютерного моделювання адсорбції макромолекул на стимул-чутливих полімерних щітках до медико-біологічних задач

Я.М. Ільницький^{1,2}, О.Ю. Калюжний¹, Д.Л. Яремчук¹

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Інститут прикладної математики та фундаментальних наук Національного університету «Львівська політехніка», 79016 Львів, вул. Митрополита Андрея, 5

3.7.1 Вступ

Адсорбція макромолекул відіграє ключову роль в медико-біологічних задачах. Одним із прикладів є взаємодія протеїнів із полімерними щітками, зокрема на щітках із зарядженими або полярними мономерами адсорбція білків може відбуватися вибірково, що широко використовується у створенні біосенсорів або матриць для селективного захоплення певних протеїнів. Інший приклад — адсорбція ферментів на поліетиленгліколевих щітках, що використовується для формування сильно іммобілізованих ферментних систем, які зберігають каталізаторну активність. Поширеним є використання полімерних щіток для керування адсорбцією ДНК та інших біополімерів. Змінюючи рН або іонну силу середовища можна керувати ступенем адсорбції та десорбції, що дозволяє застосовувати такі системи у генно-діагностичних пристроях або платформах для доставки генетичного матеріалу. У біоматеріалах полімерні щітки часто використовують для контролю адсорбції білків плазми крові. Термокеровані та фотокеровані полімерні щітки є двома перспективними представниками стимул-чутливих матеріалів, які придатні для медико-біологічних застосувань, але їх опис за допомогою атомістичних моделей є ресурсоємким. Ми виконуємо комп'ютерне моделювання таких систем із залученням мезоскопічних моделей, де релевантні атомні групи репрезентуються частинками відповідної форми із параметризованими потенціалами взаємодії між ними. Такий підхід фокусується на тенденціях у зміні характеру відгуку щітки на зовнішній чинник при варіюванні її структури, а не на відтворенні експериментальних значень її фізичних характеристик.

Це дозволяє сфокусуватись на фізичній природі механізмів, які керують відгуком цих функціональних матеріалів на вплив зовнішніх чинників.

3.7.2 Моделювання термовідгуку полі(*N*-ізопропілакриламід) (PNIPAM)

Поширеним представником стимул-чутливих полімерів є полі(*N*-ізопропілакриламід) (PNIPAM). Ключовою властивістю є зміна його гідрофільних властивостей, зумовлених формуванням водневих зв'язків із водою, на гідрофобність при нагріванні вище за нижню критичну температуру розчинності (LCST $\approx 32^\circ\text{C}$), що робить PNIPAM привабливим для фізіологічних застосувань. На мезоскопічному рівні ця властивість моделюється репараметризацією потенціалів взаємодії [1] згідно з температурною залежністю параметра Флорі-Хаггінса $\chi(T)$. Цей підхід використано в наших роботах. Ми застосовуємо комп'ютерне моделювання методом дисипативної динаміки (DPD) [2], де кожен мономер PNIPAM представлений окремою м'якою сферичною частинкою, як показано на рис. 3.7.1.

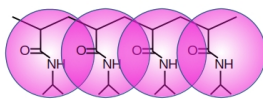


Рис. 3.7.1: Схематичне зображення фрагмента ланцюга PNIPAM у виді лінійного ланцюга мезоскопічних частинок.

Скейлінгові властивості полімерів на цьому рівні детально розглянуті в роботах [3, 4], а для параметризації PNIPAM при $T < \text{LCST}$ та при $T > \text{LCST}$ — в роботі [5]. Там же показано, що прищиплення одного кінця ланцюга до поверхні їх не змінює. Тут ми розглядаємо полімерну щітку, утворену ланцюгами фіксованої довжини $N = 60$, прищиплених до поверхні, де основним змінним параметром є густина прищиплення ρ_g . При низьких ρ_g ланцюги поводяться практично незалежно (режим «гриба»), а їхні конформації визначаються якістю розчинника. При високих ρ_g щітка стає щільною: ланцюги змушені розтягуватися і домінують взаємодії виключеного об'єму. На проміжних значеннях ρ_g очікується кроссовер між цими двома режимами. Кількісними характеристиками конформацій індивідуальних ланцюгів є їх радіус гірації R_g та довжина кінець-кінець R_e .

Характеристикою стану щітки є її ефективна висота

$$\bar{h} = 2 \frac{\int_0^{L_z} z \rho_z(z) dz}{\int_0^{L_z} \rho_z(z) dz}, \quad (3.71)$$

де $\rho_z(z)$ — густина частинок в напрямку осі OZ , а L_z — висота симуляційної комірки в цьому напрямку. Розглядаються дві параметризації потенціалів взаємодії мономерів PNIPAM з водою, які відображають основні риси щітки при $T = 298 \text{ K} < \text{LCST}$ та $310 \text{ K} > \text{LCST}$, і обчислюємо такі відношення

$$R_g^\dagger = \frac{\bar{R}_g(T = 298 \text{ K})}{\bar{R}_g(T = 310 \text{ K})}, R_e^\dagger = \frac{\bar{R}_e(T = 298 \text{ K})}{\bar{R}_e(T = 310 \text{ K})}, h^\dagger = \frac{\bar{h}(T = 298 \text{ K})}{\bar{h}(T = 310 \text{ K})}. \quad (3.72)$$

Їх залежності від ρ_g показані на рис. 3.7.2. Ефективність термовідгуку щітки задається відношенням h^\dagger , найбільшим при $\rho_g \leq 0.3$. Інші частки: R_g^\dagger та R_e^\dagger досягають максимальних значень при $\rho_g \approx 0.3$, що вказує на оптимальність цієї густини пришилення для задач термовідгуку.

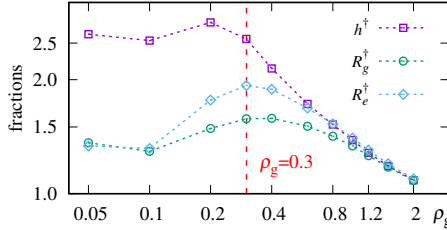


Рис. 3.7.2: Відношення, h^\dagger , R_g^\dagger та R_e^\dagger як функції ρ_g .

Полімерну щітку можна інтерпретувати за допомогою концепції блобів Александера–де Жена [6, 7]. Коли середня відстань між точками щеплення d стає меншою за \bar{R}_g ізольованого ланцюга, взаємодії виключеного об'єму змушують мономери перерозподілятися переважно нормально до поверхні, тобто ланцюги видовжуються в стопчик блобів з діаметром основи d . Кількість мономерів на блоб, n , відповідає співвідношенню масштабування $d = ln^\nu$, де $\nu = 0.5882, 0.5$ та $1/3$ відповідають умовам відповідно: хорошого, θ -типу та поганого розчинника. Інтерпретація результатів симуляції в такий спосіб призводить до відтворення закону скейлінгу

ефективної висоти щітки у виді

$$\bar{h} = h^0 + C_h \rho_g^\epsilon \quad \bar{R}_g = R_g^0 + C_g \rho_g^\epsilon \quad \bar{R}_e = R_e^0 + C_e \rho_g^\epsilon. \quad (3.7.3)$$

де $\epsilon = (1 - \nu)/(2\nu)$ [7]. Як видно з рис. 3.7.3, він справедливий в обох діапазонах: $0.1 < \rho_g < 0.5$ для $\epsilon = 0.35$ та $0.5 < \rho_g < 1.3$ для $\epsilon = 0.5$. Пояснити

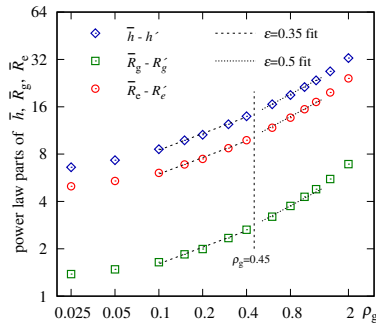


Рис. 3.7.3: Члени, пропорційні до ρ_g^ϵ у скейлінгових формах для \bar{h} , \bar{R}_g та \bar{R}_e (3.7.3) за фіксованих показників скейлінгу $\epsilon = 0.35$ та 0.5 .

такий закон скейлінгу висоти щітки можна такими механізмами.

1. Ефект скупчення сусідніх ланцюгів: проявляється коли середня відстань між точками прищеплення $d(\rho_g)$ стає меншою за R_g ізольованого ланцюга. Оскільки $d(\rho_g) = \rho_g^{-1/2}$ (рис. 3.7.4, ліворуч), цей ефект при різних температурах виникає на різних ρ_g : $\rho_g \approx 0.07$ при $T = 298$ К та $\rho_g \approx 0.5$ при $T = 310$ К. Зауважимо, що для знайденої з рис. 3.7.2 оптимальної густини прищиплення $\rho_g = 0.3$ щітка при $T = 298$ К вже перебуває в щільному режимі, а при 310 К — все ще в режимі «гриба», що і пояснює високий рівень термовіддуку в цьому випадку.
2. Стан сольватації всередині блобів змінюється з ρ_g , впливаючи на ефективний показник масштабування. Часткові координаційні числа: n_p для контактів полімер-полімер та n_w для контактів полімер-розчинник подані на рис. 3.7.4 праворуч. Загальне число $n_p + n_w$

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

близьке до 6, а збільшення ρ_g призводить до переходу від сольватованих ланцюгів ($n_w \gg n_p$) до десольватованих ($n_w \ll n_p$), із кроком при $\rho_g \approx 0.45$. Примітно, що при $\rho_g = 0.3$, де термовідгук найбільш виражений, ланцюги все ще частково сольватовані. Таким чином, область $0.1 < \rho_g < 0.5$ характеризується показником сольватації $\epsilon = 0.35$, а область $0.5 < \rho_g < 1.3$ — показником десольватації $\epsilon = 0.5$. Така картина є цілком у згоді з інтерпретацією Александра-де Жена [6, 7].

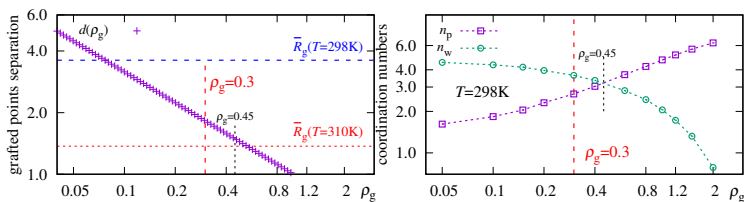


Рис. 3.7.4: Ліворуч: відстань між точками щеплення $d(\rho_g)$ з ізольованим ланцюгом \bar{R}_g при 298 та 310 К (пунктирні лінії). Праворуч: часткові координаційні числа n_p та n_w для полімеру та води навколо мономеру при 298 К.

Метою цього дослідження було : (а) оцінити, чи відтворює модель PNIPAM у виді лінійного ланцюжка ключові характеристики PNIPAM нижче та вище LCST, та (б) визначити параметри щітки, при яких вона характеризується максимальним термовідгуком. Останній знайдено при поміркованій густині щеплення, $\rho_g \approx 0.3$, коли різниця між її станом, випростуваним вверх (нижче за LCST), та станом «гриба» (вище за LCST) максимальна. Ці результати детально викладені в роботі [5] і дозволяють застосування цього методу моделювання на випадок термोकонтрольованої адсорбції/десорбції клітин, що становить зміст наступного розділу.

3.7.3 Моделювання адсорбції та десорбції клітин на структурованих термочутливих полімерних щітках

Задача сортування клітин є важливою проблемою біології і медицини [8, 9], але водночас складною для розв'язання. Типові методи включають мічення клітин маркерами — переважно флуоресцентними барвниками

3.7. Комп'ютерне моделювання адсорбції макромолекул

або магнітними частинками. Такі підходи і дорогі, і можуть бути деструктивними для функціональності клітини. Альтернативою до них може бути безмаркерне (label-free) сортування на основі функціональних поверхонь. Одним із типів поверхонь, які можуть бути використані є мікроструктуровані бінарні полімерні щітки, що містять просторові домени PNIPAM та домени поліакрилової кислоти (PAA), останні кон'юговані з клітинно-адгезивними групами [10], див. рис. 3.7.5.

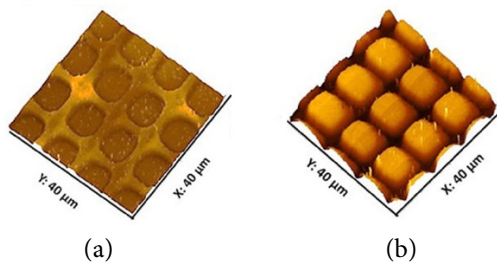


Рис. 3.7.5: Сіткоподібна мікроструктурована щітка з квадратними доменами PNIPAM $8\mu\text{m} \times 8\mu\text{m}$, та сіткою з доменів PAA шириною $2\mu\text{m}$ [10].

Вище за LCST для PNIPAM квадратні домени PNIPAM є гідрофобними і вони колапсують нижче за рівень сітки PAA, рис. 3.7.5 (a), в результаті клітина отримує можливість адсорбуватися на адгезивних групах PAA. При зниженні температури нижче за LCST, домени PNIPAM набрякають і виштовхують клітини від сітки PAA, що є сценарієм для відокремлення і подальшого вимивання клітин. Для суміші клітин різних типів, які відрізняються силою адгезією до щітки, це матиме можливість відсортувати один із типів.

Метою виконаного комп'ютерного моделювання є прогнозування оптимальної структури такої полімерної щітки з точки зору молекулярної маси ланцюгів PNIPAM та PAA; площі та щільності щеплення відповідних доменів; геометрії сітки відносно розміру комірок тощо. Всі складові модельної системи зображено на рис. 3.7.6. Для клітини використано модель із набору вкладених концентричних сфер, сформованих гармонічними зв'язками частинок із центральною частинкою. Вона характеризується сферичною формою, притаманній клітині на ранніх стадіях адсорбції.

Притягання адгезивних груп клітини до мономерів PAA моделюється без явного залучення притягальних взаємодій, а пониженням відповід-

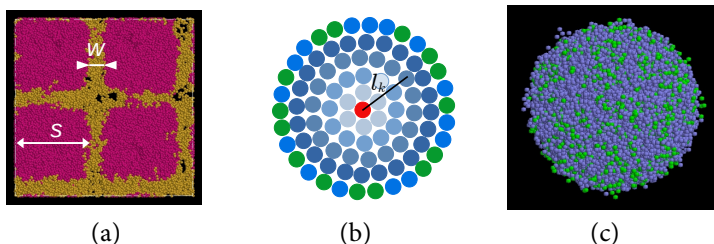


Рис. 3.7.6: (а) Модельна мікроструктурована щітка з параметрами w та s . (б) Модель клітини у виді концентричних сфер та (с) її візуалізація з комп'ютерної симуляції. Зелені частинки на поверхні клітини репрезентують її інтегріно-подібні області, які адгезивні до РАА.

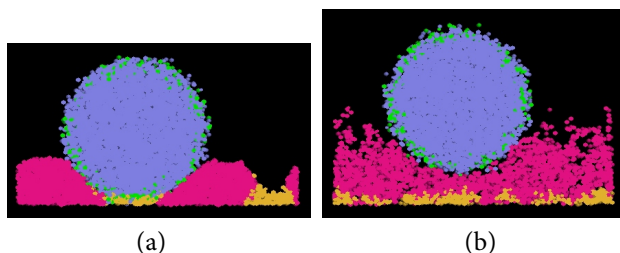


Рис. 3.7.7: (а) Адсорбція клітини при $T > LCST$ та (б) її десорбція при $T < LCST$, отримані з комп'ютерних симуляцій.

ного параметру відштовхування до $a_{INT-PAА} = 20$, порівняно з відповідним параметром $a_{PNI-PNI} = a_{PAА-PAА} = a_{W-W} = 25$ для інших пар, де PNI, PAА і W означають мономері PNIPAM, PAА і води. Це призводить до ефективного притягання між INT та PAА. Зміна гідрофобності PNIPAM при переході між $T > LCST$ та $T < LCST$ моделюється зміною параметра a_{PNI-W} від 38 до 25.6. Наслідком цього є перехід між адсорбованим та десорбованим станами клітини на щітці, які візуалізовано на рис. 3.7.7, що відтворює експериментально спостережувані стани щітки на рис. 3.7.5.

Кількісно такий перехід характеризується поведінкою енергії адсорбції, вираз для якої має такий вигляд:

$$E_{ads} \approx N_p \frac{\Delta a}{2} (1 - r^*)^2, \quad (3.7.4)$$

3.7. Комп'ютерне моделювання адсорбції макромолекул

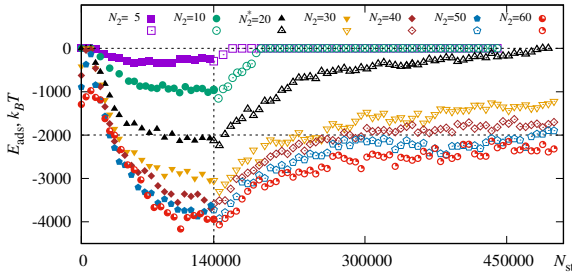


Рис. 3.7.8: Часова еволюція енергії адсорбції E_{ads} (3.7.4) для $s = 24$ та $w = 6$ за різної молекулярної ваги адгезивного полімеру PAA N_2 . N_{st} — кількість виконаних часових кроків DPD.

де N_p — сумарна кількість пар INT-PAA, $\Delta a/2(1-r^*)^2$ — вигреш в енергії при формуванні однієї пари, де $\Delta a = a_{\text{PNI-W}} - a_{\text{PNI-W}}$, а r^* — середня відстань між частинками у ній.

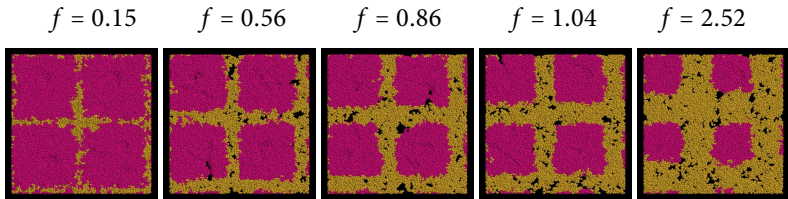


Рис. 3.7.9: Зображення набору мікроструктурованих щіток для встановлення ролі частки f між площами PAA та PNIPAM при процесах адсорбції та десорбції клітини. Випадок $N_2 = 10$.

Залежність часової еволюції E_{ads} від молекулярної ваги PAA N_2 за постійної геометрії щітки ($s = 24$ та $w = 6$) подана на рис. 3.7.8. Адсорбція клітини ($N_{\text{st}} < 140000$) відбувається на коротших часах, ніж її десорбція ($N_{\text{st}} > 140000$), причому мінімум E_{ads} суттєво залежить від N_2 лише при $N_2 < 40$, а для вищих N_2 насичується. Десорбція клітини можлива при $N \leq 20$, а при вищих N_2 вона або відбувається на суттєво довших часових масштабах, або не відбувається зовсім.

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

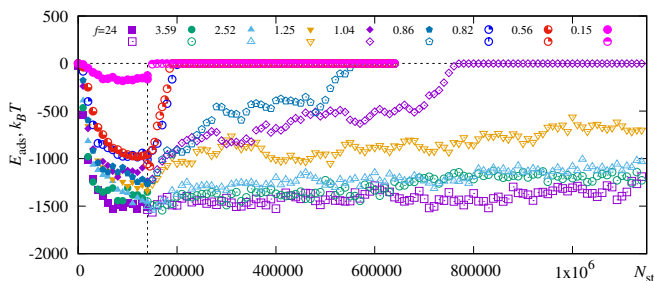


Рис. 3.7.10: Часова еволюція E_{ads} при адсорбції ($N_{\text{stp}} < 140000$) та десорбції ($N_{\text{stp}} > 140000$) для набору досліджених геометрій щітки, див. рис. 3.7.9 за фіксованої молекулярної маси РАА $N_2 = 10$.

Роль частки f між площами, зайнятими РАА та РNIPAM, досліджена шляхом моделювання набору систем, зображених на рис. 3.7.9. Результати для випадку $N_2 = 10$, подані на рис. 3.7.10, свідчать про те, що для десорбції клітини існує лише обмежений інтервал значень $f \leq 1.04$.

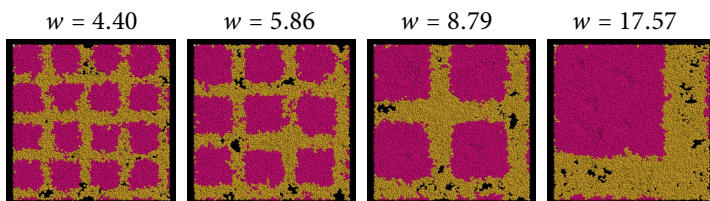


Рис. 3.7.11: Зображення набору мікроструктурованих щіток, досліджених з метою встановлення ролі зернистості їх структури (заданої через ширину w РАА областей) за фіксованої частки $f = 1$ та $N_2 = 10$.

Роль зернистості мікроструктури щітки, що характеризується шириною областей РАА w , на процеси адсорбції та десорбції клітини досліджено шляхом розгляду набору систем, вибрані зразки якого зображені на рис. 3.7.11, де вибір частки $f = 1$ зроблено на основі рис. 3.7.10. Еволюція енергії адсорбції E_{ads} та z -координати центру мас клітини R_z подані на рис. 3.7.12. Індикатор десорбції $\epsilon: E_{\text{ads}}(t) \rightarrow 0$ та $R_z(t) \rightarrow 22$.

3.7. Комп'ютерне моделювання адсорбції макромолекул

Аналогічно до попередніх випадків, рис. 3.7.8 та 3.7.10, існує обмежений інтервал значень зернистості щітки: $w \leq 13, 18$, в якому десорбція клітини можлива. В термінах діаметру модельної клітини D ця умова трансформується в $w/D \leq 0.41$. При вищих значеннях w десорбція або відбувається на дуже великих часах, або неможлива взагалі (встановлення цього вимагає значно довших часів симуляції). Також зауважимо присутність двох стадій десорбції: першої (монотонної) та другої (стрибокподібної). Зріст w має ефект відтермінування початку другої стадії на довші часи, тоді як характер другої стадії залишається незмінним. Отже, зернистість структури щітки впливає лише на динаміку десорбції: клітина легше десорбується при дрібній зернистості (малі w).

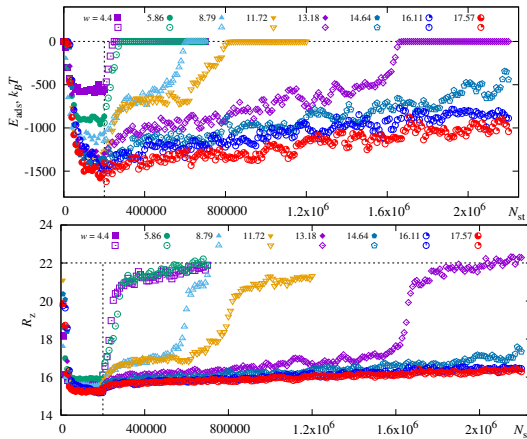


Рис. 3.7.12: (а) Часова еволюція $E_{ads}(t)$ та $R_z(t)$ при адсорбції ($N_{stp} < 200000$) та десорбції ($N_{stp} > 200000$) для набору структур з рис. 3.7.11.

Підсумовуючи результати цієї частини дослідження відзначимо, що всі розглянуті фактори: молекулярна вага РАА N_2 , частка РАА відносно РNIPAM f та зернистість структури, задана через w , суттєво впливають на термокерованість адсорбції клітин на щітці, зокрема найбільш чутливою є можливість досягнення десорбції клітини при $T < LCST$. В роботі отримані оптимальні інтервали для усіх трьох характеристик мікроструктури щітки. Ефекти чутливості десорбції до параметрів щітки підтвер-

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

джені великими енергіями адсорбції, спостережуваними на експерименті, близько тисяч $k_B T$, і десорбція клітини є великою технологічною проблемою. Слід також зазначити, що наше моделювання розглядає лише початкову стадію адсорбції клітини, коли вона зберігає свою сферичну форму. На подальших стадіях клітини мають схильність змінювати свою форму розпластуючись по поверхні за рахунок зміни конформації цитоскелету. Ця стадія залишилась поза межами нашого дослідження і може стати предметом наступних. Деталі дослідження опубліковані в роботах [11–13].

3.7.4 Моделювання оборотньої адсорбції ліпопротеїнів низької щільності на фоточутливих полімерних щітках

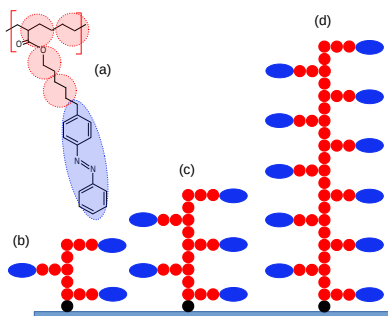


Рис. 3.7.13: (а) Схема побудови моделі азобензеновмісної поліакрилатної щітки. (б) Модельний полімерний ланцюг з довжиною остова $l_{bb} = 6, 10$ та 22 , сині видовжені групи — азобензени.

Ліпопротеїни є основними переносниками холестерину в організмі людини і тому мають велике значення для метаболічних процесів, але підвищений вміст ліпопротеїнів низької щільності (LDL) може спричинити блокування кров'яних судин підвищуючи ризик серцевих захворювань [14, 15]. Для унеможливлення цього можна: (а) підвищувати прохідність судин за допомогою стентування або (б) превентивно понижувати рівень LDL в крові. Підхід (б) також ділиться на такі варіанти: (в) вживання статинів, які впливають на роботу печінки, (г) вживання селективних адсорбентів та (д) гемоперфузійний підхід, коли адсорбери розташовані поза тілом [16]. В останньому випадку кров пацієнта вводиться в зов-

3.7. Комп'ютерне моделювання адсорбції макромолекул

нішній контейнер, де LDL селективно адсорбуються, після чого очищена кров повертається у вену пацієнта.

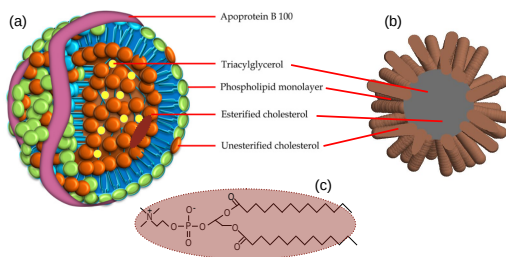


Рис. 3.7.14: (а) Структура частинки LDL [17]. (б) Модель LDL: сіра сфера — центральне однорідне ядро з холестеролу та тригліцидів, коричневі сфероциліндри — фосфоліпіди, структура яких деталізована в (с).

Найдорожчою компонентою такого апарату є адсорбент, тому підвищення його ефективності та, за можливості, його повторне використання є важливою практичною задачею. Нещодавно такий адсорбент, у формі фотокерованої розумної поверхні, був розроблений експериментальною групою Гуо [18]. Він продемонстрував його високу селективність та можливість фоторегенерації із коефіцієнтом відновлення близько 98% після п'яти робочих циклів.

Нами розроблені мезоскопічні моделі для такого адсорбента (рис. 3.7.13) та для LDL (рис. 3.7.14), які обмежуються лише тими компонентами обох систем, які беруть безпосередню участь в процесі адсорбції. В основі фотокерованості цього процесу лежить фотоізомеризація азобензенових хромофор, при якій за відсутності опромінення чи при опроміненні їх видимим світлом азобензени перебувають у неполярному *trans*-стані (у якому вони притягаються до фосфоліпідів LDL), в той час як при опроміненні їх УФ світлом вони переходять у сильнополярний *cis*-стан, спричиняючи десорбцію LDL від щітки. При виконанні комп'ютерних симуляцій використовувався метод огрубленої молекулярної динаміки (CGMD) з ефективними потенціалами типу м'якої серцевини (та притягальною частиною для *trans*-фосфоліпід пар) [19–23].

Процес адсорбції LDL на полімерній щітці проілюстровано на рис. 3.7.15 для випадку $l_{bb} = 10$ та $\rho_g = 0.02$. Зародок адсорбції — через

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

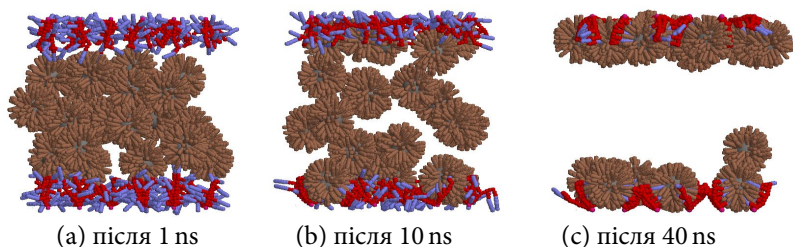


Рис. 3.7.15: Динаміка адсорбції LDL на двостінній щітці з $l_{bb} = 10$, густина пришилення $\rho_g = 0.02$.

1 ns, часткова адсорбція — через 10 ns, після 40 ns майже всі LDL частинки адсорбовано. Подібний сценарій спостерігається для всіх довжин каркасу, $l_{bb} = 5 - 22$ в широкому діапазоні густини пришилення $0.008 < \rho_g < 0.35$. В адсорбованому стані азобензени глибоко проникають у зовнішній шар LDL, як це передбачено в роботі [18].

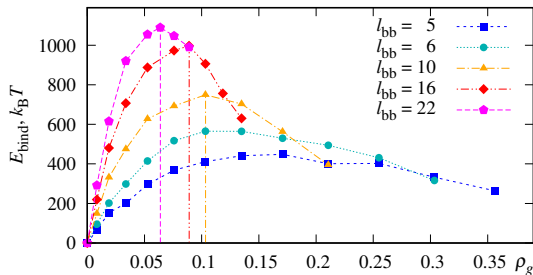


Рис. 3.7.16: Енергія зв'язку на одну частинку LDL E_{bind} в одиницях $k_B T$, як функція густини пришилення ρ_g . Положення максимумів: $\rho_g^* = 0.103$, 0.089 та 0.064 для відповідно $l_{bb} = 10$, 16 та 22 .

Безпосереднім показником ефективності адсорбції є енергія зв'язку, E_{bind} на один LDL, означена як модуль суми всіх негативних енергій V_{ij} , між парами азобензен-фосфоліпід $\langle i, j \rangle$

$$E_{\text{bind}} = \frac{1}{N_{\text{LDL}}} \left| \sum_{\langle i, j \rangle} V_{ij} \right|, \quad \text{if } V_{ij} = V_{\text{NB}}^{\text{SAP}}[d'(\mathbf{q}_{ij})] < 0. \quad (3.7.5)$$

Її залежність від ρ_g для різних довжин ланцюжків l_{bb} подана на рис. 3.7.16. Зауважимо, що отримані абсолютні значення для E_{bind} суттєво залежать від параметрів моделі, тому не порівняльні з експериментом безпосередньо. Задачею моделювання є радше пошук тенденцій в поведінці E_{bind} залежно від параметрів щітки. Серед знайдених тенденцій відзначимо те, що E_{bind} досягає максимуму при певних значеннях ρ_g^* і самі значення максимумів зростають при зрості довжини ланцюжків до $l_{bb} = 22$, див. рис. 3.7.16.

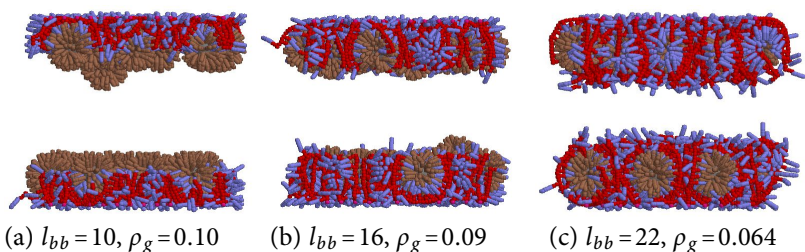


Рис. 3.7.17: Роль довжини ланцюга $l_{bb} = 10, 16$ та 22 у ефективності адсорбції LDL. ρ_g відповідають положенням максимумів E_{bind} на рис. 3.7.16.

Візуалізація щітки та адсорбованих на ній LDL для ланцюжків із довжинами $l_{bb} = 10 - 22$ при відповідних значеннях ρ_g^* для їх густин припилення проілюстрована на рис. 3.7.17. Візуалізація вказує на повне занурення LDL в область щітки при таких густинах, причому найповніше обгортання LDL ланцюжками щітки відбувається для $l_{bb} = 22$. При цьому, очевидно, збільшується кількість пар азобензен-фосфоліпід, а, отже, зростає значення E_{bind} . Додатковий аналіз вказує також на те, що в цьому разі кривизна ланцюжків відповідає кривизні зовнішнього шару LDL [24].

При густинах $\rho_g > \rho_g^*$ значення E_{bind} спадає. Причина цього візуалізована на рис. 3.7.18 для випадку $l_{bb} = 16$ та $\rho_g = 0.89$ та 0.135 , звідки видно, що при густині $\rho_g = 0.135$ щітка переходить в режим «густої щітки», в результаті чого LDL виштовхуються з її середини, чим суттєво зменшивши кількість пар азобензен-фосфоліпід, а, отже спричиняючи спад значення E_{bind} .

Рис.3.7.19 показує динаміку десорбції LDL при $l_{bb} = 10$ та $\rho_g^* = 0.103$. (а) показує початковий, адсорбований стан, отриманий після 40 ns за нормальних умов. У цьому стані азобензени знаходяться в *trans*-стані, що по-

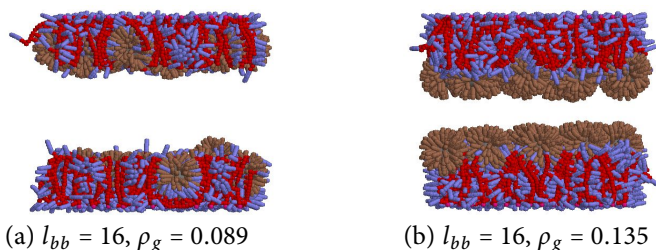


Рис. 3.7.18: Роль густини прищиплення при адсорбції LDL при фіксованій $l_{bb} = 16$. (a) оптимальна $\rho_g = 0.089$, та (b) висока $\rho_g = 0.135$.

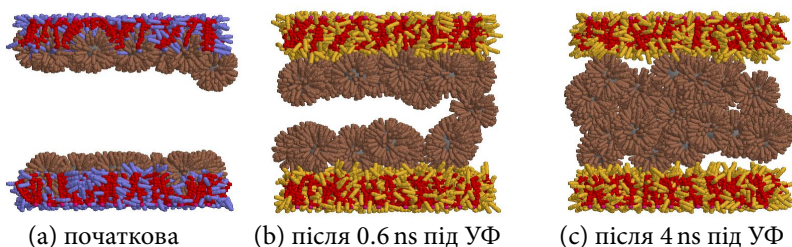


Рис. 3.7.19: Динаміка десорбції LDL на щітці з ланцюжків довжиною $l_{bb} = 10$ при $\rho_g^* = 0.103$ під дією УФ-світла. Жовті сфероциліндри моделюють *cis*-азобензени.

значається їх блакитним забарвленням. Після ввімкнення УФ-світла азобензени фотоізомеризуються у *cis*-форму, що позначається зміною їх забарвлення на жовтий, і відтоді починається процес десорбції. На першому етапі, (b), як нижній, так і верхній шари LDL виштовхуються з щітки, але підсистема LDL зберігає свою шарувату структуру. Після деякого часу опромінення, зазначеного на рисунку, шари руйнуються, і LDL рівномірно заповнюють об'єм пори, див. (c). Тепер їх можна легко вимити з пори потоком з метою регенерації адсорбента [18]. Детальний опис дослідження, поданого в даному розділі, опубліковано в роботі [24].

3.7.5 Висновки

В цій серії досліджень ми виокремили декілька задач, які мають медико-біологічний застосунок: сортування клітин мікроструктурованими по-

верхніми та пониження рівня LDL у крові за допомогою терапії гемо-перфузії. Їх пов'язує те, що в обох випадках механізмом виступає контрольована адсорбція макромолекулярних утворень на функціональній стимул-чутливій полімерній щітці та для обох зібрана обширна база експериментальних даних. У задачі про сортування клітин розглянутий випадок т.зв. безмаркерного сортування, якийощадніший до функціональності клітин. Експериментальні дослідження партнерської групи в у-ті Джорджії (США) побудовані на використанні мікроструктурованої щітки, яка містить адгезивні та термочувливості виштовхувальні компоненти. Ці роботи вказують на перспективність такого підходу до сортування, але потребують уточнень щодо деталей структури самої щітки, при дотриманні яких процес буде уможливлений та матиме високу ефективність. Ці відповіді частково отримані у нашому дослідженні, виконаному з використанням методів комп'ютерного моделювання. Ми побудували та дослідили модель термочувливого полімеру PNIPAM, яка використана для оцінки оптимальних, з точки зору ефективності контрольованої адсорбції клітини, інтервалів для молекулярної ваги адгезивної компоненти, її вагової частки та зернистості структури щітки порівняно із розмірами клітини. Для другої задачі побудовані моделі для LDL ліпопротеїнів та фоточувливої азобензено-вмісної полімерної щітки та виконана комп'ютерна симуляція процесу оборотної фотокерованої адсорбції LDL на такій щітці. Оцінена ефективність адсорбції залежно від довжини полімерних ланцюжків щітки та їх густини пришпилення до підкладки, встановлені відповідні механізми для отриманих тенденцій. Дослідження можуть бути продовжені шляхом покращення параметризації ефективних потенціалів.

Бібліографія

1. C. Soto-Figueroa, M. del Rosario Rodríguez-Hidalgo, and L. Vicente, "Dissipative particle dynamics simulation of the micellization–demicellization process and micellar shuttle of a diblock copolymer in a biphasic system (water/ionic-liquid)," *Soft Matter*, vol. 8, no. 6, pp. 1871–1877, 2012.
2. R. D. Groot and P. B. Warren, "Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 107, pp. 4423–4435, Sept. 1997.

3. J. M. Ilnytskyi and Yu. Holovatch, "How does the scaling for the polymer chain in the dissipative particle dynamics hold?," *Condensed Matter Physics*, vol. 10, p. 539, Dec. 2007.
4. O. Kalyuzhnyi, J. M. Ilnytskyi, Y. Holovatch, and C. von Ferber, "Universal shape characteristics for the mesoscopic polymer chain via dissipative particle dynamics," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 28, p. 505101, Oct. 2016.
5. D. Yaremchuk, O. Kalyuzhnyi, and J. Ilnytskyi, "Modelling thermoresponsive polymer brush by mesoscale computer simulations," *Condensed Matter Physics*, vol. 26, no. 3, p. 33302, 2023.
6. S. Alexander, "Adsorption of chain molecules with a polar head a scaling description," *Journal de Physique*, vol. 38, no. 8, pp. 983–987, 1977.
7. P. G. de Gennes, "Conformations of polymers attached to an interface," *Macromolecules*, vol. 13, pp. 1069–1075, Sept. 1980.
8. M. Salaudhin, *A Brief Concept of Cell Culture: Challenges, Prospects and Applications*, ch. 1, pp. 1–23. IntechOpen, June 2022.
9. L. G. Moro, L. P. Guarnier, M. F. Azevedo, J. A. R. Fracasso, M. A. Lucio, M. V. d. Castro, M. L. Dias, F. A. d. R. Lívero, and J. T. Ribeiro-Paes, "A brief history of cell culture: From harrison to organs-on-a-chip," *Cells*, vol. 13, p. 2068, Dec. 2024.
10. Y. Kim, A. M. Laradji, S. Sharma, W. Zhang, N. S. Yadavalli, J. Xie, V. Popik, and S. Minko, "Refining of particulates at stimuli-responsive interfaces: Label-free sorting and isolation," *Angew. Chem., Int. Ed.*, vol. 61, p. e202110990, Dec. 2021.
11. R. Badenhorst, S. Makaev, D. Yaremchuk, Y. Sajjan, A. Sulimov, V. V. Reukov, N. V. Lavrik, J. Ilnytskyi, and S. Minko, "Reversible binding interfaces made of microstructured polymer brushes," *Langmuir*, vol. 40, p. 7008–7020, Mar. 2024.
12. J. Ilnytskyi, D. Yaremchuk, and S. Minko, "Interaction of colloidal particulates with dynamic microstructured polymer brushes: Computer simulations," *Langmuir*, vol. 41, p. 12731–12744, May 2025.

13. R. Badenhorst, S. V. Makaev, M. Parker, R. Marunych, V. Reukov, A. Będzińska, O. Korchynskiy, O. Kalyuzhnyi, D. Yaremchuk, J. Ilnytskyi, T. Patsahan, and S. Minko, “Dynamic microstructured thermoresponsive interfaces for label-free cell sorting based on nonspecific interactions,” *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 17, p. 49193–49209, Aug. 2025.
14. S. Mundi, M. Massaro, E. Scoditti, M. A. Carluccio, V. W. M. van Hinsbergh, M. L. Iruela-Arispe, and R. D. Caterina, “Endothelial permeability, LDL deposition, and cardiovascular risk factors—a review,” *Cardiovascular Research*, vol. 114, pp. 35–52, Dec. 2017.
15. S. BasuRay, Y. Wang, E. Smagris, J. C. Cohen, and H. H. Hobbs, “Accumulation of PNPLA3 on lipid droplets is the basis of associated hepatic steatosis,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 116, no. 19, pp. 9521–9526, 2019.
16. Y. Yu, J. Dong, B. Ma, X. Jiang, C. Guo, Z. Liu, Y. Chai, L. Wang, L. Sun, L. Ou, and W. Li, “Bio-inspired dual-functional phospholipid–poly(acrylic acid) brushes grafted porous poly(vinyl alcohol) beads for selective adsorption of low-density lipoprotein,” *Journal of Materials Chemistry B*, vol. 9, no. 32, pp. 6364–6376, 2021.
17. L. Chávez-Sánchez, K. Chávez-Rueda, M. V. Legorreta-Haquet, E. Montoya-Díaz, and F. Blanco-Favela, “The innate immune response mediated by TLRs in atherosclerosis,” in *Inflammation, Chronic Diseases and Cancer. Cell and Molecular Biology, Immunology and Clinical Bases*, InTech, Mar. 2012.
18. C. Guo, Y. Yu, X. Jiang, B. Ma, Z. Liu, Y. Chai, L. Wang, B. Wang, Y. Du, N. Li, H. Fan, and L. Ou, “Photorenewable azobenzene polymer brush-modified nanoadsorbent for selective adsorption of LDL in serum,” *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 14, pp. 34388–34399, July 2022.
19. J. M. Ilnytskyi, J. S. Lintuvuori, and M. R. Wilson, “Simulation of bulk phases formed by polyphilic liquid crystal dendrimers,” *Condensed Matter Physics*, vol. 13, no. 3, p. 33001, 2010.
20. J. M. Ilnytskyi, A. Slyusarchuk, and M. Saphiannikova, “Photocontrollable self-assembly of azobenzene-decorated nanoparticles in bulk: Computer simulation study,” *Macromolecules*, vol. 49, p. 9272–9282, Nov. 2016.

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

21. J. M. Ilnytskyi, A. Slyusarchuk, and S. Sokołowski, "Gelation of patchy ligand shell nanoparticles decorated by liquid-crystalline ligands: computer simulation study," *Soft Matter*, vol. 14, no. 19, p. 3799–3810, 2018.
22. A. Y. Slyusarchuk, D. L. Yaremchuk, and J. M. Ilnytskyi, "Adsorption of decorated nanoparticles on a liquid crystalline polymer brush: molecular dynamics study," *Mathematical Modeling and Computing*, vol. 7, no. 2, p. 207–218, 2020.
23. A. Slyusarchuk, D. Yaremchuk, J. Lintuvuori, M. R. Wilson, M. Grenzer, S. Sokołowski, and J. Ilnytskyi, "Aided- and self-assembly of liquid crystalline nanoparticles in bulk and in solution: computer simulation studies," *Liquid Crystals*, vol. 50, p. 74–97, Jan. 2023.
24. J. Ilnytskyi, D. Yaremchuk, and O. Komarytsia, "Adsorption of low density lipoproteins on an azobenzene-containing polymer brush: Modelling by coarse-grained molecular dynamics," *Processes*, vol. 11, p. 2913, Oct. 2023.

3.8 Окремі питання застосування прогностичних і генеративних моделей машинного навчання для біохімічного дизайну

М. Дручок

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

Цей огляд присвячений застосуванню методів машинного навчання (МН) для генерації нових біоактивних сполук. Чому саме такий контекст? Сучасний процес дизайну нових ліків включає т.зв. скринінг хімічних сполук і базується як на класичних підходах, так і підходах МН. Тут виникають два основні обмеження: низька ефективність пошуку та обмеження фіксованим набором кандидатів. Генеративні методи МН долають ці обмеження, розширюючи простір пошуку та оптимізуючи стратегії протягом усього процесу пошуку. Проте перш ніж переходити до опису таких генеративних підходів, коротко окреслимо сучасний стан МН у дизайні лікарських засобів.

Після ідентифікації біологічної мішені дизайн лікарських сполук зазвичай починається з пошуку молекул-кандидатів, які володіють високою активністю по відношенню до мішені. Оскільки молекулярна структура визначає біологічну активність, ключовим завданням є побудова надійних моделей зв'язку «структура–активність» [1, 2]. Чим точніше встановлюється цей зв'язок, тим ефективнішим стає процес дизайну. Окрім активності до цільових мішеней потенційні кандидати повинні демонструвати сприятливі фармакокінетичні властивості, низьку токсичність і здатність досягати відповідних тканин чи клітинних елементів. Ці аспекти є критично важливими, оскільки багато молекул-кандидатів вибувають на доклінічних етапах випробувань через несприятливі властивості або непередбачену токсичність [3].

Оскільки на ранніх етапах дизайну ліків, перелік кандидатів може включати десятки чи сотні тисяч молекул [4], їх вичерпний скринінг класичними розрахунковими підходами виявляється обчислювально неосязним. Підходи, засновані на МН, є дієвою альтернативою за рахунок нижчої розрахункової складності, зосереджуючись або на прогностичному моделюванні (оцінюванні властивостей), або на генеративному дизайні (оптимізації структур під бажані властивості).

3.8.1 Прогностичні моделі МН

Прогностичні моделі МН застосовуються для передбачення властивостей, що становлять інтерес – від розчинності та токсичності до інгібуючої активності щодо конкретних біологічних мішеней. На Рис. 3.8.1 показано типовий приклад застосування моделі МН для передбачення властивості молекули. Спочатку молекула перетворюється з структурного представлення у чисельний формат, придатний для обчислень. До поширених чисельних представлень молекул належать молекулярні дескриптори, т.зв. фінггерпринти (напр., ECFP), молекулярні графи та ін. Вибір представлення впливає на ефективність і інтерпретованість моделей машинного навчання. Далі отримане чисельне представлення подається на вхід моделі машинного навчання, що навчається виявляти закономірності в даних. На виході модель прогнозує значення, наприклад токсичність або афінність зв'язування з мішенню. Важливою вимогою тут є якість даних з урахуванням розміру вибірки та розподілу значень властивостей у робочому діапазоні [5]. Для прикладу, існують репрезентативні набори даних для розчинності у воді, температур плавлення чи токсичності. Тим не менше, дані про активність молекул до білкових мішеней часто є обмеженими. Два ключові набори – PDBbind [6] та BindingDB [7] – агрегують експериментальні значення активностей, однак багато білків залишаються недостатньо представленими. Ця нестача може частково компенсуватися багатомішеневими моделями, що переносять знання між парами молекула–мішень, проте точність таких моделей усе ще обмежена, що підкреслює потребу в подальшому розширенні експериментальних баз [8, 9].

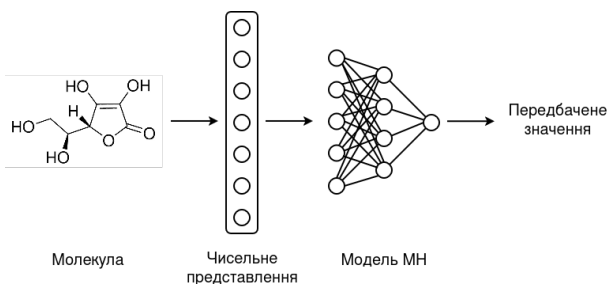


Рис. 3.8.1: Приклад застосування моделі машинного навчання для передбачення властивості молекули.

3.8. Застосування машинного навчання для біохімічного дизайну

Важливо також враховувати, що доступні дані активностей (наприклад, IC_{50}) зміщені в бік «активних» результатів, оскільки позитивні результати частіше публікуються [10, 11]. Насправді ж неактивні комбінації малих органічних сполук і білків є домінуючими в природі й тренувальні набори повинні відображати цей розподіл, інакше моделі навчатимуться некоректно. Одним із поширених підходів для коригування реалістичності наборів є додавання синтетичних негативних прикладів – випадково відібраних молекул і промаркованих як неактивні [12, 13]. Ці синтетичні дані зазвичай містять лише дискретну «мітку» неактивності, тоді як активність є неперервною величиною, тому часто застосовують дворівневий підхід [14]: спершу класифікація активності, а для активних сполук – прогнозування величин інгібування K_i чи IC_{50} .

У біоінформатиці застосовуються як класичні методи машинного навчання, так і підходи глибокого навчання. Серед класичних алгоритмів – лінійна та логістична регресія, метод опорних векторів (англ. support vector machine), дерева рішень (random forest), градієнтний бустинг (gradient boosting, напр., XGBoost чи lightgbm) і варіації усереднення за найближчими сусідами (k -nearest neighbours), які зазвичай працюють із попередньо сконструйованими молекулярними дескрипторами або фіксованими ознаками. Ці методи характеризуються достатньою інтерпретованістю, стабільною роботою на малих вибірках і низькими обчислювальними витратами. Натомість методи глибокого навчання ґрунтуються на багатопарових нейронних мережах і дають змогу автоматично вивчати ієрархічні представлення даних. Тут застосовуються повнозв'язні нейронні мережі, згорткові, рекурентні моделі, а також графові нейронні мережі, що природним чином відображають молекули у вигляді графів із атомами і хімічними зв'язками в якості вершин і граней. Моделі глибокого машинного навчання демонструють високу ефективність на великих і різноманітних наборах даних, проте це досягається коштом зниженої інтерпретованості.

Для підвищення точності прогнозів можуть використовуватися ансамблі різних моделей – оскільки різні підходи мають свої особливості, то при усередненні можуть взаємно компенсувати похибки і, як наслідок, демонструвати вищу точність порівняно з індивідуальними моделями [14, 15]. Зокрема, на Рис. 3.8.2 наведено приклад такої схеми, що складається з двох послідовних етапів: на першому етапі ансамбль класифікаційних моделей визначає, чи є молекула активною або неактивною щодо заданої біологічної мішені, тоді як на другому етапі для активних молекул

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

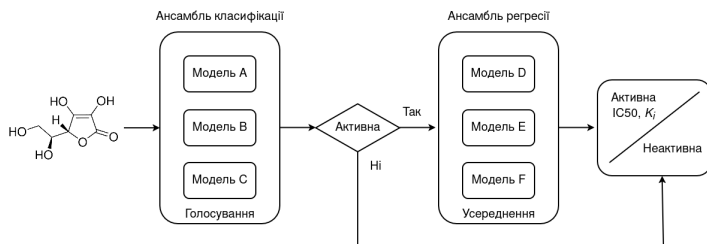


Рис. 3.8.2: Дворівнева схема передбачення активності молекул із класифікаційним і регресійним ансамблями

ансамбль регресійних моделей передбачає кількісні показники активності, зокрема значення IC_{50} або K_i . Усередині кожного етапу окремі передбачення агрегуються за допомогою стратегій голосування (для класифікації) та усереднення (для регресії). Голосування може бути як простою більшістю, так і з правом вето – молекула визнається неактивною якщо хоча б одна з моделей визнає її неактивною. Такий консервативний підхід (вето) до голосування зумовлений значною асиметрією вартості помилок на експериментальному етапі, оскільки хибнопозитивна класифікація (помилкове віднесення неактивної молекули до активних) призводить до істотно вищих витрат експериментальних ресурсів, ніж хибнонегативне рішення. В свою чергу, модульна структура ансамблів забезпечує гнучкість, дозволяючи додавати або вилучати окремі моделі, реалізовувати різні сценарії голосування чи усереднення і, що найважливіше, використати усі наявні дані (і бінарний клас, і неперервні значення активностей).

3.8.2 Генеративні підходи МН

Генеративні підходи часто використовують схему з двох компонентів: генератора та дискримінатора у генеративних змагальних мережах (англ. generative adversarial networks, GAN) [16], або агента та середовища у навчанні з підкріпленням (reinforcement learning, RL) [17].

У випадку змагальних генеративних мереж генератор навчається створювати нові молекулярні структури, що слідує розподілу тренувальних даних, тоді як дискримінатор оцінює їхню правдоподібність, намагаючись відрізнити згенеровані зразки від реальних. Навчання відбува-

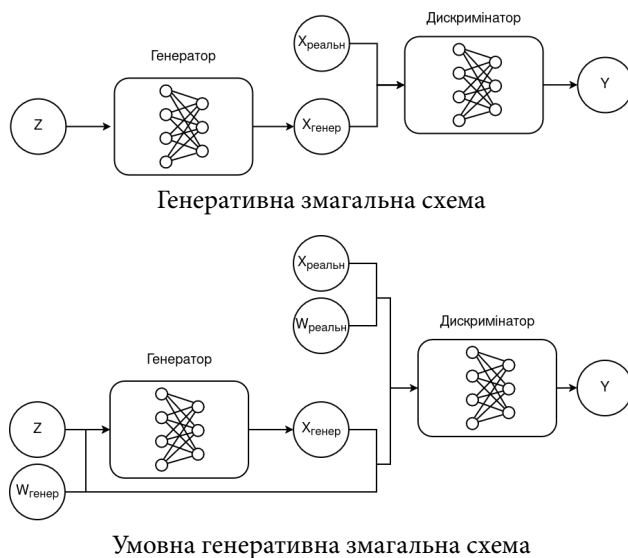


Рис. 3.8.3: Архітектури генеративних змагальних мереж: стандартна модель генерує зразки на основі випадкового шуму (вгорі) та умовна – використовує додаткові умови для контролю властивостей згенерованих даних (внизу).

ється як конкурентна гра, в якій генератор прагне мінімізувати здатність дискримінатора до розрізнення зразків, а дискримінатор – максимізувати її, що призводить до поступового зближення розподілів реальних і згенерованих даних. Змагальний процес навчання цих двох компонентів сприяє поступовому покращенню якості синтезованих молекул, зокрема з точки зору відповідності (біо)хімічним обмеженням [18–20]. Для підвищення стабільності навчання та контролю властивостей згенерованих сполук часто використовуються умовні генеративні змагальні GAN (conditional GAN), у яких генерація відбувається з урахуванням заданих фізико-хімічних або біологічних параметрів. На Рис. 3.8.3 зображено порівняння стандартної генеративної змагальної схеми з її умовною модифікацією. У стандартній схемі процес генерації залежить лише від випадкового шуму Z , а дискримінатор оцінює Y – правдоподібність згенерованих молекул $X_{\text{генер}}$, використовуючи як приклад множину реальних молекул

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

$X_{\text{реальн}}$. Натомість в умовному варіанті, і генератор, і дискримінатор додатково отримують на вхід вектор умовності W , що кодує бажані властивості (напр., розчинність, молекулярну масу чи біологічні параметри). Це дає змогу спрямовувати процес генерації таким чином, щоб отримані молекули не лише нагадували реальні дані за структурою, а й відповідали заданим цільовим властивостям. Таким чином, умовна генеративна мережа розширює класичну схему, перетворюючи її з неконтрольованої генерації на керовану, де модель вчиться узгоджувати структуру з бажаним набором фізико-хімічних характеристик.

У підходах, заснованих на **навчанні з підкріпленням**, генерація молекул формулюється як послідовний процес прийняття рішень, у якому агент поетапно модифікує молекулярну структуру, отримуючи винагороду від середовища. Функція винагороди зазвичай визначається на основі набору бажаних властивостей, таких як біологічна активність, синтетична доступність або фармакокінетичні характеристики, і може базуватися як на евристичних правилах, так і на попередньо навчених прогностичних моделях (описаних вище). Перевагою підходів RL є можливість безпосередньої оптимізації цільових властивостей, однак їхня ефективність значною мірою залежить від коректного формулювання простору станів, дій та функції винагороди. Оптимізація може бути як одноцільовою (напр., максимізація активності щодо конкретного білка [21]), так і багаточільовою, де одночасно враховуються кілька показників (напр., токсичність, розчинність, температура плавлення та ін.) [22–26]. У дизайні лікарських сполук важливими є як селективність щодо однієї мішені для уникнення побічних ефектів, так і поліфармакологія для впливу на кілька мішеней одночасно [27, 28]. І селективність, і поліфармакологія передбачають застосування методів багаточільової оптимізації, коли відбувається одночасна максимізація активності відносно одних білків і мінімізація відносно інших. МН також допомагає у задачах т.зв. drug repurposing, коли проводиться пошук активності відомих медичних препаратів до інших мішеней – це дозволяє скоротити фазу апробації, оскільки ці ліки вже її пройшли у відповідного регулятора. Ще однією важливою вимогою є хімічна коректність згенерованих кандидатів, додатково контролюючи їх різноманітність, новизну, складність і вартість синтезування [29].

У класі підходів машинного навчання із підкріпленням, **пошук по дереву методом Монте Карло** (англ. Monte Carlo Tree Search – MCTS) зарекомендував себе як ефективна стратегія для цілеспрямованої генерації молекул [30]. У контексті молекулярного дизайну дерево рішень ін-

терпретується як простір послідовних модифікацій структури, де кожна гілка відповідає допустимій хімічній операції. Зокрема, перехід між вузлами відповідає додаванню, заміні або видаленню атомів чи хімічних зв'язків. Таким чином, шлях у дереві відповідає конкретній послідовності структурних перетворень, що формують нову молекулу з покращеними властивостями. Завдяки ітеративній розвідці структур MCTS поєднує локальне «заглиблення» у перспективні області з ширшим дослідженням простору [31]. Перевага такого заглиблення полягає в тому, що кожен наступний крок пошуку ґрунтується на локальній оцінці попередньо розглянутих часткових структур, дозволяючи поступово уточнювати напрям оптимізації вздовж найбільш перспективних гілок дерева рішень. Розширення вузлів відбувається на основі локальної статистики (значень винагороди та частоти відвідування), що забезпечує формальний компроміс між експлуатацією гілок із високою очікуваною винагородою та дослідженням менш відвідуваних, але потенційно перспективних напрямів. У поєднанні з прогностичними моделями властивостей MCTS керує пошуком молекул з бажаними фармакологічними характеристиками, що було продемонстровано як у багатоцільових [32–34], так і в одноцільових задачах [35, 36].

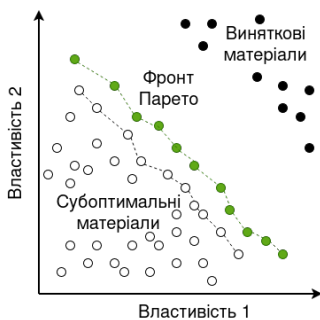


Рис. 3.8.4: Ілюстрація фронту Парето у задачі багатоцільової оптимізації матеріалів. Чорні заповнені точки позначають область бажаних рішень – сполук, що забезпечують оптимальний компроміс між цільовими властивостями. Порожні точки – субоптимальні сполуки. Фронт Парето (зелена ламана крива) проходить через найкращі знайдені сполуки (зелені заповнені точки).

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

У багатоцільовій оптимізації функція винагороди часто будується як зважена сума нормалізованих цільових параметрів [37], адаптивне зважування [38], чи геометричне середнє [39], що сприяє збалансованому покращенню всіх цілей. Альтернативним підходом є оптимізація Парето, що дозволяє уникнути явного вибору вагових коефіцієнтів шляхом побудови множини недомінованих рішень – фронту Парето (Рис. 3.8.4), який визначає оптимальні компроміси між різними властивостями та забезпечує більшу різноманітність потенційних кандидатів [33, 40, 41]. У процесі генерації молекул кожен новий кандидат перевіряється на домінування відносно поточного фронту; доміновані кандидати (володіють гіршим набором властивостей) відкидаються, тоді як недоміновані додаються до фронту з одночасним вилученням рішень, які вони домінують.

Автоенкодерні моделі МН доповнюють клас генеративних підходів. Класичний автоенкодер складається з двох нейронних мереж – енкодера та декодера (Рис. 3.8.5) – які навчаються відображати вхідні представлення у компактний латентний простір і відновлювати їх назад [42, 43]. У задачах молекулярного дизайну автоенкодери забезпечують навігацію латентним простором для генерації нових сполук шляхом інтерполяції, екстраполяції або спрямованої оптимізації векторів латентного простору [44, 45]. Внаслідок цього згенеровані молекули зазвичай структурно близькі до тренувальних даних, що сприяє їхній хімічній коректності та можливості синтезу. Для оптимізації фармакологічних властивостей латентний простір автоенкодерів часто поєднується з прогностичними моделями, що дозволяє здійснювати пошук молекул із покращеними характеристиками, такими як біологічна активність, розчинність або токсичність.

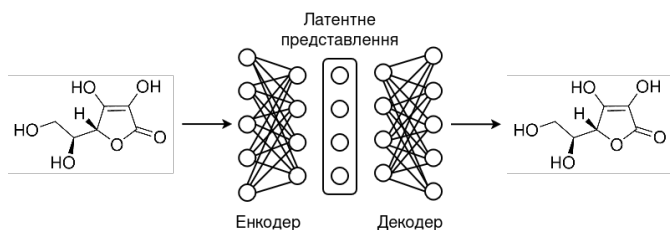


Рис. 3.8.5: Автоенкодер для хімічних структур: енкодер переводить молекулярну структуру в латентне представлення, а декодер відновлює відповідну структуру.

чність [46–48]. Такі підходи природно підтримують багатocільову оптимізацію та можуть використовуватися як у задачах *de novo* дизайну, так і для модифікації відомих хімічних фрагментів [49, 50]. Водночас обмеження автоенкодерних методів пов'язані з залежністю від якості молекулярних представлень і складністю забезпечення коректної генерації для дискретних хімічних структур, що стимулює подальший розвиток гібридних та граф-орієнтованих архітектур.

3.8.3 Перспективи

Попри вже досягнутий прогрес у застосуванні методів МН до задач генерації молекул і передбачення їхніх властивостей, галузь активно розвивається. Одним із ключових напрямів є інтеграція моделей МН із фізично обґрунтованими методами, зокрема підходами квантової хімії та молекулярної динаміки. Поєднання швидких прогностичних моделей із точнішими, але обчислювально затратними методами, дозволяє побудувати багаторівневі схеми оптимізації, у яких МН використовується для первинного фільтрування кандидатів, а фізичні моделі — для їх уточненої оцінки.

Окрему увагу привертає поява так званих фундаментальних моделей (англ. *foundation models*) для хімії – великих нейронних мереж, попередньо навчених на масивних корпусах хімічних структур і реакцій. Такі моделі формують універсальні чисельні представлення, що можуть бути адаптовані до широкого спектру задач: від передбачення властивостей до генерації нових сполук і планування синтезу. Попереднє навчання на великих неанотованих наборах даних потенційно дозволяє зменшити залежність від вузькоспеціалізованих експериментальних вибірок.

Перспективними є стратегії активного навчання, в яких модель не лише прогнозує властивості, а й визначає, які саме експерименти або розрахунки є найбільш інформативними для подальшого покращення точності. Такий ітеративний цикл «модель–експеримент–оновлення моделі» є особливо ефективним за умов обмежених експериментальних ресурсів.

Важливою є також автоматизація повного циклу розробки лікарських засобів у рамках концепції “*self-driving laboratory*”, де алгоритми МН поєднуються з роботизованими експериментальними платформами. Генеративна модель формує гіпотези щодо нових молекул, прогностичні моделі оцінюють їх властивості, а автоматизовані експериментальні установки

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

здійснюють синтез і тестування, забезпечуючи замкнений цикл оптимізації. Ці системи вже існують, впроваджуються і активно вдосконалюються.

Водночас залишаються відкритими питання інтерпретованості моделей, коректної оцінки невизначеності прогнозів і уникнення систематичних зміщень у даних. Подолання цих викликів вимагатиме поєднання статистичних методів, теоретичної хімії та експериментальної валідації. Таким чином, подальший прогрес у застосуванні машинного навчання до молекулярного дизайну пов'язаний не лише з удосконаленням окремих алгоритмів, але й із побудовою інтегрованих, фізично обґрунтованих та експериментально верифікованих систем, здатних ефективно досліджувати величезний хімічний простір.

Бібліографія

1. Edward O. Pyzer-Knapp, Kewei Li, and Alan Aspuru-Guzik. Learning from the harvard clean energy project: The use of neural networks to accelerate materials discovery. *Advanced Functional Materials*, 25(41):6495–6502, 2015.
2. Gisbert Schneider. Automating drug discovery. *Nature Reviews Drug Discovery*, 17(2):97–113, 2018.
3. Anju Choorakottayil Pushkaran and Alya A. Arabi. From understanding diseases to drug design: can artificial intelligence bridge the gap? *Artificial Intelligence Review*, 57(4), 2024.
4. Martin Steinhauser and Stefan Hiermaier. A review of computational methods in materials science: Examples from shock-wave and polymer physics. *International Journal of Molecular Sciences*, 10(12):5135–5216, 2009.
5. Chiranjib Chakraborty, Manojit Bhattacharya, Soumen Pal, and Md. Aminul Islam. Generative ai in drug discovery and development: the next revolution of drug discovery and development would be directed by generative ai. *Annals of Medicine and Surgery*, 86(10):6340–6343, August 2024.
6. PDBbind. <http://www.pdbbind.org.cn>. Accessed 05-Oct-2023.
7. BindingDB. <https://www.bindingdb.org>. Accessed 20-Jan-2025.

8. Tymofii Nikolaienko, Oleksandr Gurbych, and Maksym Druchok. Complex machine learning model needs complex testing: Examining predictability of molecular binding affinity by a graph neural network. *Journal of Computational Chemistry*, 43(10):728–739, 2022.
9. Hui Zhu, Jincal Yang, and Niu Huang. Assessment of the generalization abilities of machine-learning scoring functions for structure-based virtual screening. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 62(22):5485–5502, 2022.
10. Richard T Johnson and Kay Dickersin. Publication bias against negative results from clinical trials: three of the seven deadly sins. *Nature Clinical Practice Neurology*, 3(11):590–591, 2007.
11. Kerry Dwan, Douglas G. Altman, Juan A. Arnaiz, Jill Bloom, An-Wen Chan, Eugenia Cronin, Evelyne Decullier, Philippa J. Easterbrook, Erik Von Elm, Carrol Gamble, Davina Ghersi, John P. A. Ioannidis, John Simes, and Paula R. Williamson. Systematic review of the empirical evidence of study publication bias and outcome reporting bias. *PLoS ONE*, 3(8):e3081, 2008.
12. Kathrin Heikamp and Jürgen Bajorath. Comparison of confirmed inactive and randomly selected compounds as negative training examples in support vector machine-based virtual screening. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 53(7):1595–1601, 2013.
13. Elena L. Cáceres, Nicholas C. Mew, and Michael J. Keiser. Adding stochastic negative examples into machine learning improves molecular bioactivity prediction. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 60(12):5957–5970, 2020.
14. Maksym Druchok, Dzvenymyra Yarish, Sofiya Garkot, Tymofii Nikolaienko, and Oleksandr Gurbych. Ensembling machine learning models to boost molecular affinity prediction. *Computational Biology and Chemistry*, 93:107529, 2021.
15. J.-Q. Chen, H.-Y. Chen, W.-j. Dai, Q.-J. Lv, and C.Y.-C. Chen. Artificial intelligence approach to find lead compounds for treating tumors. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 10(15):4382–4400, 2019.

16. Ian J. Goodfellow, Jean Pouget-Abadie, Mehdi Mirza, Bing Xu, David Warde-Farley, Sherjil Ozair, Aaron Courville, and Yoshua Bengio. Generative adversarial nets. In *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, pages 2672–2680, 2014.
17. Richard S. Sutton and Andrew G. Barto. *Reinforcement Learning: An Introduction*. MIT Press, Cambridge, MA, 1998.
18. Artur Kadurin, Sergey Nikolenko, Kuzma Khrabrov, Alex Aliper, and Alex Zhavoronkov. drugan: An advanced generative adversarial autoencoder model for de novo generation of new molecules with desired molecular properties in silico. *Molecular Pharmaceutics*, 14(9):3098–3104, 2017.
19. Lukasz Maziarka, Agnieszka Pocha, Jan Kaczmarczyk, Krzysztof Rataj, Tomasz Danel, and Michal Warchoł. Mol-cyclegan: a generative model for molecular optimization. *Journal of Cheminformatics*, 12(1), 2020.
20. Amit Gangwal, Azim Ansari, Iqar Ahmad, Abul Kalam Azad, Vinoth Kumarasamy, Vetriselvan Subramaniyan, and Ling Shing Wong. Generative artificial intelligence in drug discovery: basic framework, recent advances, challenges, and opportunities. *Frontiers in Pharmacology*, 15:1331062, 2024.
21. Marcus Olivecrona, Thomas Blaschke, Ola Engkvist, and Hongming Chen. Molecular de-novo design through deep reinforcement learning. *Journal of Cheminformatics*, 9(1), 2017.
22. Niclas Stahl, Göran Falkman, Alexander Karlsson, Gunnar Mathiason, and Jonas Boström. Deep reinforcement learning for multiparameter optimization in de novo drug design. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 59(7):3166–3176, 2019.
23. Yibo Li, Jianfeng Pei, and Luhua Lai. Structure-based de novo drug design using 3d deep generative models. *Chemical Science*, 12(41):13664–13675, 2021.
24. Quentin Perron, Olivier Mirguet, Hamza Tajmouati, Adam Skiredj, Anne Rojas, Arnaud Gohier, Pierre Ducrot, Marie-Pierre Bourguignon, Patricia Sansilvestri-Morel, Nicolas Do Huu, Françoise Gellibert, and Yann Gaston-Mathé. Deep generative models for ligand-based de novo design applied to multi-parametric optimization. *Journal of Computational Chemistry*, 43(10):692–703, 2022.

25. Sebastian Jurczak and Maksym Druchok. Cancer immunotherapies ignited by a thorough machine learning-based selection of neoantigens. *Advanced Biology*, 8(10), 2024.
26. Will R. Pitt, Jonathan Bentley, Christophe Boldron, Lionel Colliandre, Carmen Esposito, Elizabeth H. Frush, Jola Kopec, Stéphanie Labouille, Jerome Meneyrol, David A. Pardoe, Ferruccio Palazzesi, Alfonso Pozzan, Jacob M. Remington, René Rex, Michelle Southey, Sachin Vishwakarma, and Paul Walker. Real-world applications and experiences of ai/ml deployment for drug discovery. *Journal of Medicinal Chemistry*, 68(2):851–859, 2025.
27. A Srinivas Reddy and Shuxing Zhang. Polypharmacology: drug discovery for the future. *Expert Review of Clinical Pharmacology*, 6(1):41–47, 2013.
28. M. K. G. Abbas, Abrar Rassam, Fatima Karamshahi, Rehab Abunora, and Maha Abouseada. The role of ai in drug discovery. *ChemBioChem*, 25(14), 2024.
29. Xiangru Tang, Howard Dai, Elizabeth Knight, Fang Wu, Yunyang Li, Tianxiao Li, and Mark Gerstein. A survey of generative ai for de novo drug design: new frontiers in molecule and protein generation. *Briefings in Bioinformatics*, 25(4), 2024.
30. Thaer M. Dieb, Shenghong Ju, Junichiro Shiomi, and Koji Tsuda. Monte carlo tree search for materials design and discovery. *MRS Communications*, 9(2):532–536, 2019.
31. Dony Ang, Cyril Rakovski, and Hagop S. Atamian. De novo drug design using transformer-based machine translation and reinforcement learning of an adaptive monte carlo tree search. *Pharmaceuticals*, 17(2):161, 2024.
32. Hiroaki Iwata, Taichi Nakai, Takuto Koyama, Shigeyuki Matsumoto, Ryosuke Kojima, and Yasushi Okuno. Vgae-mcts: A new molecular generative model combining the variational graph auto-encoder and monte carlo tree search. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(23):7392–7400, 2023.
33. Takamasa Suzuki, Dian Ma, Nobuaki Yasuo, and Masakazu Sekijima. Mothra: Multiobjective de novo molecular generation using monte carlo tree search. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 64(19):7291–7302, 2024.

34. Jingyi Zhao, Yuxuan Ou, Austin Tripp, Morteza Rasoulianboroujeni, and José Miguel Hernández-Lobato. Generative model for synthesizing ionizable lipids: A monte carlo tree search approach, 2024.
35. Seiji Kajita, Tomoyuki Kinjo, and Tomoki Nishi. Autonomous molecular design by monte-carlo tree search and rapid evaluations using molecular dynamics simulations. *Communications Physics*, 3(1), 2020.
36. Yicheng Lin, Jiakang Ma, Haozhe Yuan, Ziqiang Chen, Xingyu Xu, Mengping Jiang, Jialiang Zhu, Weida Meng, Wenqing Qiu, and Yun Liu. Integrating reinforcement learning and monte carlo tree search for enhanced neoantigen vaccine design. *Briefings in Bioinformatics*, 25(3), 2024.
37. Robin Winter, Floriane Montanari, Andreas Steffen, Hans Briem, Frank Noé, and Djork-Arné Clevert. Efficient multi-objective molecular optimization in a continuous latent space. *Chemical Science*, 10(34):8016–8024, 2019.
38. Il Young Kim and Olivier L. de Weck. Adaptive weighted sum method for multi-objective optimization: a new method for pareto front generation. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 31(2):105–116, 2005.
39. Tatsuya Yoshizawa, Shoichi Ishida, Tomohiro Sato, Masateru Ohta, Teruki Honma, and Kei Terayama. Selective inhibitor design for kinase homologs using multiobjective monte carlo tree search. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 62(22):5351–5360, 2022.
40. Xuhan Liu, Kai Ye, Herman W. T. van Vlijmen, Michael T. M. Emmerich, Adriaan P. IJzerman, and Gerard J. P. van Westen. Drugex v2: de novo design of drug molecules by pareto-based multi-objective reinforcement learning in polypharmacology. *Journal of Cheminformatics*, 13(1), 2021.
41. Giuseppe Lamanna, Pietro Delre, Gilles Marcou, Michele Saviano, Alexandre Varnek, Dragos Horvath, and Giuseppe Felice Mangiatordi. Genera: A combined genetic/deep-learning algorithm for multiobjective target-oriented de novo design. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(16):5107–5119, 2023.
42. Diederik P. Kingma and Max Welling. Auto-encoding variational bayes. In Yoshua Bengio and Yann LeCun, editors, *2nd International Conference on Learning Representations, ICLR 2014, Banff, AB, Canada, April 14-16, 2014, Conference Track Proceedings*, 2014.

43. Danilo Jimenez Rezende, Shakir Mohamed, and Daan Wierstra. Stochastic backpropagation and approximate inference in deep generative models. In Eric P. Xing and Tony Jebara, editors, *Proceedings of the 31st International Conference on Machine Learning*, volume 32, No. 2 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 1278–1286, Beijing, China, 22–24 Jun 2014. PMLR.
44. Rafael Gómez-Bombarelli, Jennifer N. Wei, David Duvenaud, José Miguel Hernández-Lobato, Benjamín Sánchez-Lengeling, Dennis Sheberla, Jorge Aguilera-Iparraguirre, Timothy D. Hirzel, Ryan P. Adams, and Alán Aspuru-Guzik. Automatic chemical design using a data-driven continuous representation of molecules. *ACS Central Science*, 4(2):268–276, 2018.
45. Jaechang Lim, Seongok Ryu, Jin Woo Kim, and Woo Youn Kim. Molecular generative model based on conditional variational autoencoder for de novo molecular design. *Journal of Cheminformatics*, 10(1), 2018.
46. Sunghoon Joo, Min Soo Kim, Jaeho Yang, and Jaehyun Park. Generative model for proposing drug candidates satisfying anticancer properties using a conditional variational autoencoder. *ACS Omega*, 5(30):18642–18650, 2020.
47. Maksym Druchok, Dzvenymyra Yarish, Oleksandr Gurbych, and Mykola Maksymenko. Toward efficient generation, correction, and properties control of unique drug-like structures. *Journal of Computational Chemistry*, 42(11):746–760, 2021.
48. Andrij Vasylenko, Jacinthe Gamon, Benjamin B. Duff, Vladimir V. Gusev, Luke M. Daniels, Marco Zanella, J. Felix Shin, Paul M. Sharp, Alexandra Morscher, Ruiyong Chen, Alex R. Neale, Laurence J. Hardwick, John B. Claridge, Frédéric Blanc, Michael W. Gaultois, Matthew S. Dyer, and Matthew J. Rosseinsky. Element selection for crystalline inorganic solid discovery guided by unsupervised machine learning of experimentally explored chemistry. *Nature Communications*, 12(1), September 2021.
49. Daniel Flam-Shepherd, Tony C Wu, and Alan Aspuru-Guzik. MPGVAE: improved generation of small organic molecules using message passing neural nets. *Machine Learning: Science and Technology*, 2(4):045010, 2021.
50. Andrij Rovenchak and Maksym Druchok. Machine learning-assisted search for novel coagulants: When machine learning can be efficient even

3. Наукові огляди з актуальних проблем фізики м'якої речовини

if data availability is low. *Journal of Computational Chemistry*, 45(13):937–952, 2024.

4 Основні результати

4.1 Спонтанне формування структур у бінарних сумішах з конкуруючими взаємодіями

О.В. Пацаган

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1,
e-mail: oksana@icmp.lviv.ua

Запропоновано теоретичний опис мікрофазного розшарування у бінарній симетричній суміші з конкуруючими взаємодіями [1,2]. Досліджено модель, в якій частинки двох сортів, що взаємодіють із потенціалом SALR, змішуються між собою і перехресна взаємодія є відштовхувальною на малих і притягальною на великих відстанях. Для такої моделі знайдено, що періодичні структури формуються при значно вищих температурах, ніж у випадку однокомпонентної системи частинок з потенціалом SALR. Цей висновок стосується класу моделей із взаємодіями $u_{12}(r) = -u_{ii}(r)$ таких, що $V(r) = u_{ii}(r)\theta(r-1)$ у представленні Фур'є має глобальний мінімум для відмінного від нуля хвильового вектора.

Досліджено суміші як з однаковими, так і з різними концентраціями компонентів. Для суміші рівних концентрацій отримано фазову діаграму з врахуванням флуктуацій. У цьому випадку теорія і моделювання передбачають співіснування низькогустинної неупорядкованої фази з високогустинною ламеларною фазою з чергуванням шарів, багатих першим і другим компонентом [1]. Для моношару суміші з різними концентраціями отримано фазові діаграми в наближенні середнього поля для широкого діапазону хімічних потенціалів компонентів і температури. Знайдено три стабільні фази з періодичною концентрацією: ламеларну фазу, яка складається з чергування смуг двох компонентів при схожих хімічних потенціалах, і дві фази з гексагональним розташуванням кластерів компонента меншої концентрації у рідині компонента більшої концентрації. Виявлено, що гексагональна фаза виникає тільки при відносно високій температурі, область стабільності цієї фази збільшується з підвищенням темпе-

4. Основні результати

ратури. Теоретичні результати підтверджені моделюванням Монте Карло для окремих термодинамічних станів [2].

1. O. Patsahan, M. Litniewski, A. Ciach, *Soft Matter* 17, 2883 (2021).
2. O. Patsahan, A. Meyra, A. Ciach, *Soft Matter* 20, 1410 (2024).

4.2 Структура концентрованих електролітів: результати, отримані з мезоскопічної теорії

О.В. Пацаган

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1,
e-mail: oksana@icmp.lviv.ua

Класичні теорії, розроблені для розведених електролітів, стають незастосовними, коли середня відстань між іонами є співмірною з їхніми діаметрами. Різні експериментальні методи, наближені теорії та комп'ютерне моделювання дають суперечливі результати щодо розподілу іонів і екранування заряджених об'єктів у концентрованих іонних системах. Зокрема, для таких систем виявлено, що кореляційна довжина кореляцій заряд-заряд, λ_s , задовільняє скейлінгове співвідношення $\lambda_s/\lambda_D \propto (a/\lambda_D)^n$, де λ_D – радіус Дебая, a – діаметр іона, проте, у різних дослідженнях знайдено різні значення n .

В [1–3] досліджено кореляційну функцію заряд-заряд в рамках мезоскопічної теорії, яка враховує скінченний розмір іонів і флуктуації локального заряду. Для дуже великих густин іонів отримано $n = 3$ [1], що узгоджується з експериментальними даними з вимірювання поверхневих сил [4]. В [2] застосовано теорію до ширшого діапазону густин іонів і виявлено, що різні значення n можуть бути достатньо добрим наближенням для λ_s/λ_D у різних діапазонах a/λ_D . Експериментально знайдений скейлінг виконується для $2 < a/\lambda_D < 4$, і отримано $n = 3$ для цього діапазону. Для менших a/λ_D знайдено $n = 2$, що було отримано раніше в кількох теоретичних дослідженнях і в симуляціях, і ще ближче до лінії Кірквуда отримано $n = 1.5$, що також було передбачено в різних роботах. Для перевірки точності цих результатів у [3] було враховано флуктуаційний внесок в обернену кореляційну функцію заряд-заряд, яким раніше нехтувалося.

Розраховано кореляційні довжини та амплітуди і показано, що врахування флуктуаційного внеску не призводить до суттєвих змін результатів.

1. A. Ciach, O. Patsahan, *J.Phys.: Condens. Matter* **33**, 37LT01 (2021).
2. A. Ciach, O. Patsahan, *J. Mol. Liq.* **377**, 121453 (2023).
3. O. Patsahan, A. Ciach, *Condens. Matter Phys.* **28**, 23601 (2025).
4. A.M. Smith, A.A. Lee, S. Perkin, *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 2157 (2016).

4.3 Іонна рідина в ультратонкій плоскій порі

М. Дудка

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1, e-mail: maxdudka@icmp.lviv.ua

² Співпраця \mathbb{L}^4 і Докторський коледж 'Статистична фізика складних систем', Ляйпціг-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа

³ Національний Університет «Львівська політехніка»

Досліджено поведінку іонної рідини в ультратонкій плоскій порі, що містить тільки один шар іонів, в рамках двовимірної тристанової ґраткової моделі. Розраховано фазову діаграму в широкому діапазоні значень міжіонної взаємодії, прикладеної напруги та іонофобності пори за допомогою комп'ютерних симуляцій та аналітично в рамках наближення ґратки Бете (Рис. 4.3.1). Виявлено кореляцію між величиною енергії, накопиченої у порі, та термодинамічним станом іонної рідини при нульовій напрузі. Якщо іони в порі перебувають у впорядкованому стані, система залишається в цьому стані, доки не буде прикладена напруга, достатня для руйнування цього впорядкування, що ефективно зміщує процес заряджання до вищих напруг і може призвести навіть до суттєвого збільшення накопиченої енергії [1].

1. Y. Groda, M. Dudka, A. A. Kornyshev, G. Oshanin, S. Kondrat. *Superionic Liquids in Conducting Nanoslits: Insights from Theory and Simulations*. *J. Phys. Chem. C* **125** 4968 (2021) [doi: 10.1021/acs.jpcc.0c10836].

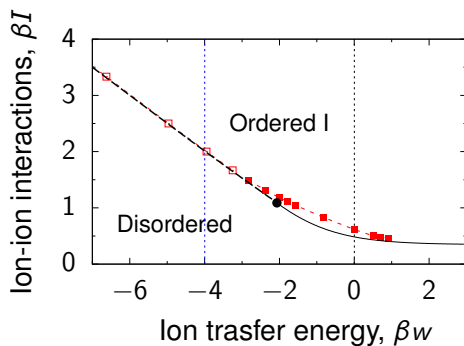


Рис. 4.3.1: Фазова діаграма іонної рідини в ультратонкій плоскій порі. Результати розрахунків у рамках наближення ґратки Бете з координаційним числом $q = 4$ показані лініями, а результати симуляцій методом Монте-Карло на квадратній ґратці – квадратами. Чорний кружечок показує трикритичну точку. Чорна суцільна лінія та червоні квадрати позначають неперервні фазові переходи другого роду, а чорна пунктирна лінія та незафарбовані квадрати – першого роду між невпорядкованою та впорядкованою фазами.

4.4 Загальний беззіткнений кінетичний підхід до вивчення збуджень у квантових атомних газах з довільним спіном

М. Булахов, О.С. Пелетминський, Ю.В. Слюсаренко

Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ
НАН України, вул. Академічна 1, 61108, Харків, Україна,
e-mail: slusarenko@kipt.kharkov.ua

Розроблено загальний кінетичний підхід до вивчення високочастотних колективних збуджень у квантових газах із довільним спіном [1]. З цієї метою сформульовано багаточастинковий гамільтоніан, який включає мультипольну обмінну взаємодію, а також зв'язок мультипольного моменту із зовнішнім полем. Після лінеаризації здобутого беззіткненого кінетичного рівняння знайдено загальне дисперсійне рівняння, яке дозволяє досліджувати високочастотні колективні моди для атомів з довіль-

ним спіном, що підпорядковуються тій чи іншій квантовій статистиці. Проаналізовано деякі з його частинних розв'язків, що описують спінові хвилі та нульовий звук для газів Бозе та Фермі.

Обговорюється питання відповідності розробленого підходу умовам реальних експериментів із ультрахолодними газами в магнітооптичних пастках із суттєво неоднорідним полем. Зазначається, що попри це, у своєму нинішньому вигляді підхід дозволяє використовувати загальні рівняння для досить повного розуміння структури та природи високочастотних колективних спектрів збудження для конкретного атомного спіну. Однак обговорено також шляхи, якими запропонований підхід можна узагальнити на випадок наявності магнітного поля захоплення.

Відмінною рисою розробленого підходу є його універсальність: придатність для довільного спіну і квантової статистики, а також повне та послідовне врахування мультипольних ступенів свободи.

1. M. Bulakhov, A.S. Peletminskii, Yu.V. Slyusarenko, *Annals of Physics* 474 (2025) 169920.

4.5 Стан порушеної осьової симетрії та магнітна діаграма станів конденсату зі спіном 1 через призму квадрупольних ступенів вільності

М. Булахов, О.С. Пелетминський, Ю.В. Слюсаренко

Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ
НАН України, вул. Академічна 1, 61108, Харків, Україна,
e-mail: slusarenko@kipt.kharkov.ua

Вивчається слабковзаємодійний газ атомів зі спіном 1 з конденсатом Бозе-Ейнштейна у зовнішньому магнітному полі в рамках підходу Боголюбова. Для цього використовується загальний гамільтоніан, який включає спінові і квадрупольні обмінні взаємодії, а також зв'язки спінового та квадрупольного моментів із зовнішнім магнітним полем (лінійні та квадратичні зеєманівські члени). Останній відповідає за виникнення стану з порушеною осьовою симетрією.

Досліджено всі можливі магнітні стани, що виникають у взаємодійному спин-1 конденсаті, з загальним урахуванням квадрупольних ступенів свободи [1]. Роль останніх подвійна: вони забезпечують зв'язок між

4. Основні результати

квадрупольним моментом і прикладеним магнітним полем, а також генерують міжатомну квадрупольну обмінну взаємодію. У контексті ультрахолодного атомного газу останнє має сенс під час розгляду нелокальних ефектів міжатомної взаємодії.

Для всіх магнітних станів знайдено відповідні термодинамічні характеристики, такі як намагніченість, квадрупольний момент і термодинамічний потенціал. Здобуто також тригілковий спектр збудження стану з порушеною осьовою симетрією. Цей стан має ряд унікальних властивостей: усі компоненти вектора стану (три проекції спіну) заселені, вектор намагніченості не паралельний прикладеному магнітному полю, а математичне очікування квадрупольного оператора не має нульових матричних елементів, що вказує на значну магнітну анізотропію. Нарешті, побудовано діаграми магнітних станів для кожного режиму стану з порушеною осьовою симетрією.

1. M. Bulakhov, A.S. Peletminskii, S.V. Peletminskii, and Yu.V. Slyusarenko, J. Phys. A: Math. Theor. 55 (2022) 405003 (20pp).

4.6 Посилення надпровідного спарювання в моделі Фермі–Габбарда за допомогою квантового контролю

О. Повітчан¹, Д.І. Бондар², А.Г. Сотніков^{1,3}

¹ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, ННІ «Фізико-технічний факультет», площа Свободи 4, 61022 Харків, Україна

² Department of Physics and Engineering Physics, Tulane University, 6823 St. Charles Avenue, New Orleans, Louisiana 70118, USA

³ Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут», Інститут теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера, вул. Академічна 1, 61108 Харків, Україна

У роботі показано, що квантовий контроль за Ляпуновим забезпечує ефективну стратегію для посилення надпровідних кореляцій у моделі Фермі–Габбарда без необхідності ретельного налаштування параметрів [1]. Хоча фотоіндукована надпровідність чутлива до частоти та амплітуди монохроматичного лазерного імпульсу, запропонований підхід вико-

ристовує простий протокол на основі зворотного зв'язку, який запобігає зменшенню надпровідних кореляцій, як тільки вони починають формуватися. Цей метод дозволяє значно посилити спарювання в широкому діапазоні початкових умов накачування, усуваючи необхідність складної оптимізації частоти та амплітуди. Крім того, розроблений підхід може бути адаптований для пригнічення раніше індукованих надпровідних кореляцій, забезпечуючи двоспрямований контроль над станами квантового спарювання. Ці результати пропонують практичні шляхи керування квантовими кореляціями в сильно взаємодійних системах з мінімальною експериментальною складністю.

1. Oleksandr Povitchan, Denys I. Bondar, and Andrii G. Sotnikov, Enhancement of superconducting pairing via quantum Lyapunov control Phys. Rev. A **112**, 033117 (2025).

4.7 Про «універсальну» теорію бозонного піка в аморфних матеріалах

А.М. Швайка, М.А. Шпот, Т.М. Брик

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1,
e-mail: ashv@icmp.lviv.ua

Походження характерної особливості на коливних спектрах стекло і аморфних матеріалів, включаючи колоїди і білки, у формі широкосмугової низькочастотної моди (від 4 до 12 меВ), що називається бозонним піком, є предметом багаторічних дискусій. Багато пояснень залучають колективні збудження, які нагадують фононні моди в кристалах, але існують і альтернативні підходи, для прикладу, коливання в багатодолинових потенціалах або в наноструктурах і нанопорах. На даний час немає консенсусу щодо фізичного механізму виникнення бозонного піка, а тому великий інтерес викликають роботи, в яких пропонується простий і загальний теоретичний опис низькочастотної динаміки неупорядкованих систем.

Ми провели критичний розгляд [1,2] одного з підходів до опису бозонного піка [3], який здобув певну популярність у свій час. Показано, що розглянута в [3] модель із «загасанням Ахієзера» насправді є моделлю Дебая з зв'язкістю. Для цієї моделі ми отримали точні аналітичні вирази

4. Основні результати

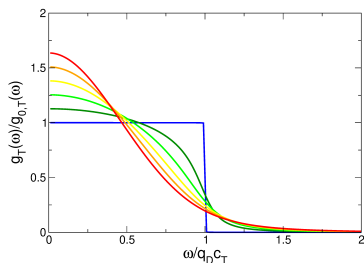


Рис. 4.7.1: Коливна густина станів для різних значень в'язкості («загасання Ахієзера»).

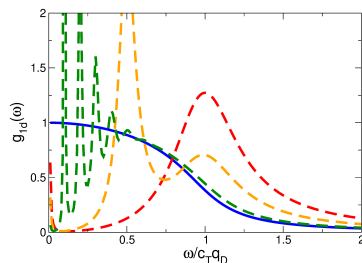


Рис. 4.7.2: Коливна густина станів для різної дискретизації одновимірного інтеграла.

для коливної густини станів (Рис. 4.7.1) і не виявили наявності бозонного піка. Натомість в [3], тривимірний інтеграл по сфері Дебая був підмінений одновимірною дискретною сумою, що дало передбачувано хибний результат з дискретним набором піків від коливних гармонік для коротких ланцюжків (Рис. 4.7.2), які автори помилково ототожнили з бозонним піком.

1. A. Shvaika, M. Shpot, W. Schirmacher, T. Bryk, G. Ruocco, *Comment on “Universal origin of boson peak vibrational anomalies in ordered crystals and in amorphous materials,”* Phys. Rev. Lett. **127**, 179601 (2021) [doi: 10.1103/PhysRevLett.127.179601].
2. A. Shvaika, M. Shpot, W. Schirmacher, T. Bryk, G. Ruocco, *Absence of a boson peak in anharmonic phonon models with Akhiezer-type damping*, arXiv Preprint arxiv.org/abs/2104.13076 (2021).
3. M. Baggioli, A. Zaccone, *Universal origin of boson peak vibrational anomalies in ordered crystals and in amorphous materials*, Phys. Rev. Lett. **122**, 145501 (2019) [doi: 10.1103/PhysRevLett.122.145501].

4.8 Пропагаторна щілина для поперечних збуджень в бінарних рідинах

Т. Брик

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

Поперечний довгохвильовий звук не підтримується в рідинах. Однак, на нано-масштабах можуть поширюватись поперечні збудження, які називають зсувними хвилями (shear waves). Для них дисперсія починається з не-нульового значення хвильового числа, яке визначає ширину так званої пропагаторної щілини. Комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки (еквімолярних 50–50 ленард-джонсівських сумішей та рідин 80–20 моделі Коба–Андерсена) дозволило проаналізувати поперечну динаміку бінарних рідин та встановити з максимумів спектральних функцій поперечного повного та концентраційного потоків дисперсію зсувних хвиль та високочастотних оптичних поперечних мод.

З моделювання встановлено, що пропагаторна щілина для зсувних хвиль у бінарних рідинах зростає зі збільшенням різниці мас компонент R. Однак, існуючий вираз для щілини однокомпонентних рідин не дозволяє пояснити такі результати симуляцій. Було побудовано теорію пропагаторної щілини для зсувних хвиль у бінарних рідинах в рамках аналітичного підходу узагальнених колективних мод. Аналітично отримано розв'язки чотири-змінної моделі поперечної динаміки бінарної рідини в довгохви-

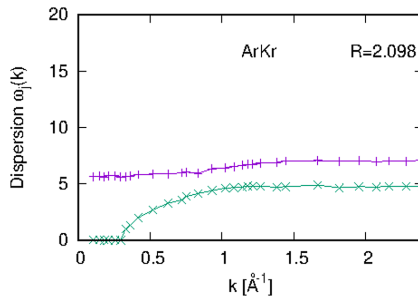


Рис. 4.8.1: Дисперсія зсувних хвиль та оптичних мод для еквімолярної рідкої суміші KrAr, отримана з комп'ютерного моделювання.

4. Основні результати

льовій області. З чотирьох власних мод такої динамічної моделі пара високочастотних пропаторних збуджені відповідає оптичним модам. Частота поперечних оптичних мод зростає зі зростанням співвідношення мас компонент R, а також зростає вплив крос-кореляції між оптичними модами і зсувними хвилями. Отримано аналітичний вираз для пропаторної щільності бінарних рідин, який явно містить крос-кореляцію між низькочастотними (оптичними) гілками поперечних збуджень та пояснює зростання пропаторної щільності з ростом R. При відсутності таких крос-кореляцій вираз для пропаторної щільності переходить у вираз щільності для однокомпонентної рідини.

1. Taras Bryk, Maria Kopcha, Ihor Yidak. Propagation gap for shear waves in binary liquids: Analytical and simulation study. *J. Chem. Phys.* vol.161 (2024) 184505.

4.9 Моделювання поведінки та властивостей розчинів протеїнів і антитіл

Ю.В. Калюжний

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

Протягом останніх п'яти років проведено комплекс теоретичних досліджень, спрямованих на опис асоціації білків у розчинах та її впливу на фізико-хімічні властивості, з особливим акцентом на системи імуноглобулінів. Основною метою було створення узагальнених статистико-механічних моделей, здатних відтворювати експериментально спостережувані ефекти, такі як фазове розшарування, утворення кластерів і зміни реологічних характеристик.

Досліджено стабільність сумішей імуноглобулінів із сироватковим альбуміном людини у водних буферних розчинах. Антитіла моделювалися як Y-подібні структури, утворені із семи твердих сфер, тоді як глобулярні білки описувалися як сферичні частинки з локалізованими центрами зв'язування. Теоретичний опис базувався на термодинамічній теорії збурень Вертгейма, що дозволило визначити рівняння стану, хімічні потенціали та фазові діаграми. Отримані результати добре узгоджуються з експериментальними даними для фазового розшарування.

Окремий напрямок досліджень був присвячений впливу просторового обмеження на поведінку розчинів моноклональних антитіл. Конфайнмент моделювався у вигляді жорстких сферичних перешкод, що взаємодіють із антитілами. Показано, що такі обмеження істотно змінюють фазову поведінку системи. Виявлено немонотонний вплив сили притягання між антитілами та матрицею: зі зростанням цієї взаємодії область фазового розшарування спочатку розширюється, а потім звужується, що супроводжується появою реентрантної поведінки.

Значну увагу приділено розвитку теоретичних підходів до опису асоціації білків. Показано, що традиційні моделі, засновані на сферичному наближенні, є недостатніми для опису анізотропних взаємодій. Використання теорії Вертгейма для асоційованих рідин дозволило суттєво розширити можливості моделювання, що було узагальнено в оглядових дослідженнях.

У останніх роботах розглянуто системи бі-специфічних антитіл зі складнішою будовою. Такі молекули моделювалися як агрегати з більшої кількості твердих сфер із урахуванням асиметрії та гнучкості. Досліджено вплив цих факторів на фазове розшарування, другий вірйальний коефіцієнт і в'язкість розчинів. Отримані результати узгоджуються з експериментальними даними та підтверджують ефективність запропонованих підходів.

Загалом показано, що методи статистичної механіки рідин, зокрема теорія Вертгейма, є ефективним інструментом для опису складної поведінки білкових систем, де ключову роль відіграють асоціація, анізотропія взаємодій та просторове обмеження.

1. Kalyuzhnyi, Y. V.; Vlachy, V. *Journal of Molecular Liquids* 2022, 365, 120006.
2. Hvozdz, T.; Kalyuzhnyi, Y. V.; Vlachy, V. *Soft Matter* 2022, 18, 9108–9117.
3. Vlachy, V.; Kalyuzhnyi, Y. V.; Hribar-Lee, B.; Dill, K. A. *Biomolecules* 2023, 13, 1703.
4. Hvozdz, T.; Kalyuzhnyi, Y. V.; Vlachy, V. *Journal of Molecular Liquids* 2024, 402, 124740.

4.10 Дослідження властивостей плямистих колоїдів

Ю.В. Калюжний

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

Протягом звітного періоду проведено систематичні дослідження структури, термодинаміки та фазової поведінки систем плямистих (patchy) колоїдів. Основна увага приділялася розробці аналітичних методів у рамках статистичної механіки рідин та їх перевірки за допомогою комп'ютерного моделювання.

Досліджено бінарні суміші сферичних і плямистих колоїдів на основі багатогустинного рівняння Орнштейна–Церніке. Теорія дозволяє отримати аналітичні вирази для структурних і термодинамічних характеристик системи. Порівняння з результатами моделювання показало високу точність опису, що підтверджує її придатність для аналізу асоціативних колоїдних систем.

Вивчено вплив просторового обмеження на поведінку плямистих колоїдів у випадкових пористих середовищах. Показано, що наявність притягальних перешкод істотно змінює фазову поведінку системи. Для колоїдів із обмеженою валентністю виявлено реверсивну фазову діаграму газ–рідина з так званим «порожнім рідким» станом. Взаємодія з матрицею призводить до формування просторово неоднорідних структур із локалізацією частинок поблизу перешкод.

Розроблено аналітичну теорію валентно-обмежених колоїдних систем із використанням замикання Перкуса–Йевики. Система зводиться до розв'язку набору алгебраїчних рівнянь для часток зв'язаних станів. Теоретичні результати добре узгоджуються з даними комп'ютерного моделювання для структурних характеристик, тоді як для енергетичних величин точність є дещо нижчою.

Окремо досліджено більш складні асоціативні системи, зокрема полімерно-ензимні комплекси. Запропонована модифікація теорії Вертгейма забезпечує підвищену точність у порівнянні з традиційними підходами.

У новітніх роботах проаналізовано конкуренцію між самоасоціацією колоїдів і їх зв'язуванням із функціоналізованим пористим середовищем. Показано, що така конкуренція може призводити до складної фазової поведінки, включаючи появу реверсивних фазових діаграм із кількома критичними точками.

Загалом встановлено, що поєднання аналітичних методів теорії рідин із комп'ютерним моделюванням є ефективним підходом для дослідження колоїдних систем із напрямленими взаємодіями та просторовими обмеженнями.

1. Kalyuzhnyi, Y. V.; Nezbeda, I.; Cummings, P. T. *Soft Matter* 2021, 17, 3513.
2. Hvozdz, T. V.; Kalyuzhnyi, Y. V.; Vlachy, V.; Cummings, P. T. *J. Chem. Phys.* 2022, 156, 161102.
3. Kalyuzhnyi, Y. V.; Jamnik, A.; Cummings, P. T. *J. Mol. Liquids* 2023, 371, 121073.
4. Butovych, H.; Kalyuzhnyi, Y. V.; Patsahan, T.; Ilnytskyi, J. *J. Mol. Liquids* 2023, 385, 122321.
5. Kalyuzhnyi, Y. V.; Patsahan, T.; Holovko, M.; Cummings, P. T. *Nanoscale* 2024, 16, 4668.

4.11 Статистичний підхід до опису процесів транспорту ліпопротеїнів та інших компонент у кровоносних судинах

М.В. Токарчук^{1,2}

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, 79013, Львів, Україна

Запропоновано статистичний підхід опису нерівноважних процесів переносу компонент крові у системі просвіт-ендотелій-інтима кровоносних судин [1]. Такий підхід передбачає врахування характеру взаємодій компонент крові, які у тій чи іншій мірі беруть участь в атеросклеротичних процесах. В основі його лежать параметри скороченого опису: нерівноважні середні значення густин компонент крові, іонів, молекули води, зокрема ліпопротеїни низької щільності (ЛПНЩ), ліпопротеїни високої щільності (ЛПВЩ), моноцити, та інших компонент (еритроцити, лейкоцити, тромбоцити) та нерівноважне значення густини повного імпульсу крові для підсистеми просвіту судин; в області ендотелію-інтими параметрами скороченого опису є нерівноважні середні значення густин компонент ЛПНЩ, ок-ЛПНЩ, ЛПВЩ, макрофаги, молекули

4. Основні результати

води, іони, вільні радикали, оксиданти, вітамін С, прозапальні та про-тизапальні цитокіни, Т-клітини, макромолекулярні структури ендотелій-інтима. Використавши метод нерівноважного статистичного оператора для параметрів скороченого опису, отримано систему рівнянь переносу, яка в рамках вибраної моделі взаємодії компонент може описувати не-марковські у часі та нелокальні у просторі процеси переносу крові у судинах з врахуванням можливих реакційно-дифузійних процесів у стінках судин. В усі рівняння при відповідних ядрах переносу входить гідродинамічна швидкість крові, як один із важливих параметрів досліджень. Крім того, дана система рівнянь переносу є незамкнутою, нелінійною і може бути застосована до опису як ламінарних процесів, так і турбулентних. Важливо зазначити, що у першій підсистемі-просвіті застосовувався в'язко реакційно-дифузійний опис, а у підсистемі ендотелій-інтима — реакційно-дифузійний. Крім того, у такому підході враховано електромагнітні поля, створювані іонами та дипольними молекулами, зокрема води, напруженості яких задовільняють усередненим рівнянням Максвелла.

1. Tokarchuk M.V. Statistical Approach to Describing the Processes of Transport of Lipoproteins and Other Components in Blood Vessels – I. Math. Model. Comput., 12(4), 1263–1294 (2025).

4.12 Проблеми води в НБК-ОУ. Теоретичний опис процесів взаємодії води, водних розчинів із паливовмісними матеріалами

М.В. Токарчук^{1,2}, О.Л. Іванків¹

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, 79013, Львів, Україна

Питання про взаємодію лавоподібних паливовмісних мас (ЛПВМ) з атмосферою, водою та водними розчинами є одним із ключових при вирішенні комплексу проблем, пов'язаних як з аналізом поточного стану ядерного палива у різних формах в об'єкті «Укриття», а з листопада 2016 року у Новому безпечному конфайнменті («Арка») – об'єкт «Укриття»

(НБК-ОУ), так і з отриманням довгострокових прогнозних оцінок на майбутнє. В [1] проаналізовано основні механізми та умови взаємодії ЛПВМ з атмосферою, водою та водними розчинами в умовах НБК-ОУ. Обчислювальні та теоретичні оцінки впливу водного розчину на властивості у пористій матриці ЛПВМ під час сорбції розчину показали, що:

- у приповерхневій області об'ємної фази «розчин – поверхня ЛПВМ» гетерогенні коефіцієнти дифузії іонів UO_2^{2+} , Cs^+ мають область швидкої дифузії, що пов'язано з ефектами електрополяризації;
- атмосферна вологість, що взаємодіє з ЛПВМ, може збільшувати коефіцієнт дифузії урану на кілька порядків зі збільшенням відносної вологості.

Розглянуто модель дифузії, що описує процеси взаємодифузії та швидкість проникнення у пористе середовище фронту реакції внутрішнього гідролізу кремній-кисневої сітки під час взаємодії з водним розчином. На її основі отримано оцінки вивільнення іонів із матриці залежно від співвідношення коефіцієнтів взаємодифузії, швидкості внутрішнього гідролізу та часу взаємодії. Дифузійну модель вилуговування необхідно узагальнити з урахуванням особливостей взаємодії ЛПВМ з водними розчинами. У цьому випадку, зокрема, необхідно враховувати той факт, що через негативний заряд поверхні ЛПВМ іони водню, що утворюються під час процесів радіолізу у приповерхневій області, швидко будуть електростатично притягуватися до поверхні ЛПВМ і тим самим активувати механізми іонного обміну для вивільнення радіонуклідів з матриці ЛПВМ у розчин.

1. Tokarchuk M.V., Markovych B.M., Zakharyash O.S., Ivankiv O.L., Mohnyak S.M. Description processes of the interaction of water and aqueous solutions with fuel-containing materials in the New Safe Confinement of the “Shelter” object. *Condens. Matter Phys.*, 28(1), 11601: 1–18 (2025).

4.13 Динамічна дифрактометрія квазідвовимірних структур

В.В. Лізунов, О.С. Скакунова, С.В. Лізунова

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна,
e-mail: lizunov.vyacheslav@gmail.com

Встановлено особливості динамічної дифракції Рентгенових променів у випадку геометрії дифракції за Бреггом на системі графенова плівка/підкладинка SiC. Продемонстровано необхідність врахування під час розгляду таких систем варіативності параметра ґратниці кількочарової графенової плівки, а також впливу її товщини на тепловий фактор Дебая–Валлера.

Показано, що навіть невеликі зміни структурних характеристик системи графенова плівка/підкладинка, а також її деформованого стану приводять до істотної зміни дифракційного профілю, що уможливорює визначати зазначені параметри рентгенодифракційним методом.

Запропонований підхід дає змогу коректно описати дифракційні профілі структури графенова плівка/підкладинка в області Бреґгового піку від підкладинки через врахування впливу підкладинки та наявних у ній мікродефектів на картину розсіяння.

1. Olena S. Skakunova, Stepan I. Olikhovskii, Taras M. Radchenko, Svitlana V. Lizunova, Tetyana P. Vladimirova, and Vyacheslav V. Lizunov, X-Ray Dynamical Diffraction by Quasi-Monolayer Graphene, *Scientific Reports*, **13**: 15950 (2023).

4.14 Вплив нанорозмірних домішок різної природи на структурно-чутливі властивості нанокompозитних сплавів на основі олова

Ю.О. Плевачук

Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра фізики металів

Протягом звітнього періоду проведено експериментальні та теоретичні дослідження впливу нанорозмірних домішок різної природи на структурно-чутливі властивості нанокompозитних сплавів на основі олова в процесах еволюції їхньої мікроструктури та фазового складу. Досліджено вплив домішок різної природи – карбонових нанотрубок та наносфер, керамічних наночастинок (Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 , ZrO_2), а також їхніх модифікацій із металевим покриттям (Au, AuPd, Ni, Pt) на формування мікроструктури, фазового складу, теплофізичні та механічні властивості нанокompозитних сплавів і паяних з'єднань з мідною підкладкою.

Широке використання безсвинцевих припоїв в електронних пристроях передбачає надійність паяних з'єднань у широкому діапазоні робочих температур, який також поширюється на субнульові температури. Ґрунтуючись на попередніх позитивних результатах у зміцненні паяних з'єднань за підвищених температур після додавання керамічних наночастинок до металеві матриці припою, було проведено дослідження впливу нанорозмірних домішок у безсвинцевих припоях Sn–3.5Ag–0.5Cu після тривалого впливу субнульових температур. Напилення наночастинок металами було проведено методом модифікації поверхні, що вирішило проблему виготовлення композитних припоїв, пов'язану з незмішуванням неактивних оксидів та металеві матриці. Дослідження зосереджено на мікроструктурі та міцності на зсув паяних з'єднань, утворених між нанокompозитним припоем та двома мідними підкладками, як за кімнатної температури, так і після 4 місяців витримування при $-20\text{ }^\circ\text{C}$. Результати експериментальних досліджень показали, що додавання нанорозмірних керамічних домішок, модифікованих металами, до основної матриці припою призводить до зниження швидкості росту інтерметалевих шарів у паяних з'єднаннях. Дані випробувань, проведених на зразках після впливу мінусових температур, не показали значного зниження міцності на зсув, що демонструє їхню ефективність для паяння компонентів в електронних

4. Основні результати

пристроях, які можуть працювати в широкому діапазоні від мінусових до підвищених температур.

Легкоплавкі безсвинцеві припої відіграють вирішальну роль у процесі ступінчастого паяння, який зазвичай використовується у виробництві багаточіпових модулів, а також оптоелектронних компонентів. Оскільки вони допомагають мінімізувати термічні пошкодження, їх також використовують для з'єднання температурно-чутливих компонентів у високонадійній електроніці. Питомий електричний опір еквіатомних багатокомпонентних сплавів Bi-In-Sn-Zn, Bi-In-Zn-Sn-Cu та Bi-In-Sn-Zn-Cu-Ag, як ключова характеристика припоїв, досліджено в широкому діапазоні температур від кімнатної до рідкого стану з особливою увагою до області плавлення-кристалізації. Проаналізовано особливості фазових трансформацій і поведінки питомого опору, виявлених за допомогою ДСК та рентгенівської дифракції. Показано, що модифікація бінарних та потрійних сплавів на основі Sn, Ag, Cu додатковими елементами (Bi, In, Zn) може суттєво знизити температуру паяння.

Отримані результати щодо впливу наночастинок різного типу на мікроструктуру, структурно-чутливі та механічні властивості нанокомпозитних сплавів на основі олова у широкому температурно-часовому інтервалі мають значення як для фундаментальних наукових досліджень, так і для практичних застосувань. Вони відкривають можливість створення нових функціональних нанокомпозитних матеріалів, у яких нанорозмірні частинки, введені в об'ємну матрицю, забезпечують контроль фізико-хімічних і механічних властивостей сплаву у широкому діапазоні. Нанокомпозитні припої на основі Sn з досліджуваними нанодомішками зберігають стабільні структурно-чутливі та механічні властивості після тривалої витримки за субнульових температур, що підтверджує їхню перспективність для використання в електронних пристроях, які працюють у складних експлуатаційних умовах. Отримані наукові результати розширюють уявлення про взаємозв'язок між мікроструктурою, фазовим складом і структурно-чутливими властивостями нанокомпозитних сплавів на основі та створюють наукове підґрунтя для розроблення нових безсвинцевих припоїв із керованими характеристиками для різних галузей промисловості.

1. A. Yakymovych, K. Khrushchuk, I. Wodak, Yu. Plevachuk, P. Švec Sr., P. Švec, L. Orovčík, G. Khatibi. Hybrid Solder Joints: Morphology and Mechanical Properties of Lead-Free Sn-3.5Ag/Cu Solder Joints with Ni-coated Ceramic

Nanoparticles. *Materials Science & Engineering A* (submitted 11.01.2026). Manuscript Number: MSEA-D-26-00263.

2. I. Černíčková, L. Ďuriška, M. Drienovský, Yu. Plevachuk, P. Švec Sr., P. Danišovičová, T. Machajdík, R. Moravčík, R. Čička. Influence of gallium addition on the microstructure, thermal behavior, mechanical and electrical properties of SAC305 lead-free solder and solder joints. *Journal of Materials Research and Technology*. – 2025. – Vol. 39. – P. 528–547. doi: 10.1016/j.jmrt.2025.09.096.

3. Yu. Plevachuk, V. Poverzhuk, P. Švec Sr, P. Švec, L. Orovčík, O. Bajana. Effect of sub-zero temperature on the reliability of SAC305/Cu nanocomposite solder joints. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. – 2025. – Vol. 36. – P. 898 (13 pages). doi: 10.1007/s10854-025-14984-9.

4. I. Shtablavyi, Y. Nykyruy, Y. Kulyk, O. Kovalskiy, Yu. Plevachuk, S. Mudry. Structure evolution during the heating processes of Fe-based amorphous alloys induced by low power laser treatment. *High Temperatures-High Pressures*. – 2025. – Vol. 54.2. – P. 113–127. doi: 10.32908/hthp.v54.1927.

5. Yu. Plevachuk, P. Švec Sr., I. Maňko, D. Janičkovič, A. Yakymovych, I. Gejdos Janotova, V. Poverzhuk. Electrical resistivity of multicomponent Bi-In-Sn-Zn-Cu-Ag alloys for low-temperature lead-free solders. *Journal of Physical Studies*. – 2025. – Vol. 29(4). – P.4601 (7 p.). doi: 10.30970/jps.29.4601.

6. B. Butvinová, I. Gejdoš Janotová, P. Svec, I. Maňko, D. Janičkovič, Yu. Plevachuk. Soft magnetic properties of FeCoB/Cu nanocrystalline ribbons. *IEEE Transactions on Magnetics* – 2025.

7. Yu. Plevachuk, V. Poverzhuk, P. Švec Sr, P. Švec, L. Orovčík, O. Bajana. Effect of Au-deposited ceramic nanoparticles on SAC305/Cu solder joints. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. – 2024. – Vol. 35. – P. 2182 (13 pages). doi: 10.1007/s10854-024-13943-0.

8. Yu. Plevachuk, V. Poverzhuk, P. Svec Sr., P. Svec, I. Janotová, D. Janickovic, A. Rud. Electrical resistivity of lead-free solders reinforced by carbon nanospheres. *Int. J. Thermophysics* – 2024. – Vol. 45. – P. 31(14). doi: 10.1007/s10765-023-03326-8.

9. V. Poverzhuk, Yu. Plevachuk, P. Švec Sr., L. Orovčík, O. Bajana. Effect of Ni-deposited carbon nanotubes on morphology and shear strength of lead-free solder joints. *Journal of Physical Studies*. – 2024. – Vol. 28 (3). – P. 3602 [6 p.]. doi: 10.30970/jps.28.3602.

10. Yu. Plevachuk, L. Romaka, I. Janotova, P. Švec, D. Janičkovič, R. Novakovic, V. Poverzhuk. Microstructure and thermophysical properties of low-temperature high-entropy alloys. *Defect and Diffusion Forum*. – 2024. – Vol. 431. – P. 21–

4. Основні результати

33. doi: 10.4028/p-gL7mcS.

11. Yu. Plevachuk, P. Švec Sr, P. Švec, L. Orovčík, O. Bajana, A. Yakymovych, A. Rud. Metal deposited nanoparticles as “bridge materials” for lead-free solder nanocomposites. *Appl Nanosci* – 2023. – Vol. 13. – P. 7387–7397. doi: 10.1007/s13204-023-02898-z.

12. Reiplinger B., Plevachuk Y., Brillo J. Experimental study of density, molar volume and surface tension of the liquid Ti-V system measured in electromagnetic levitation. *High Temperatures – High Pressures*, 2023, 52(2), pp. 175–190. doi: 10.32908/hthp.v52.1355.

13. Ю. Плевачук, Л. Ромака. В'язкість бінарних розплавів на основі Cu. *Журнал фізичних досліджень*. 27(1) (2023) 1601 [6 стор.] doi: 10.30970/jps.27.1601; Yu. Plevachuk, L. Romaka. Viscosity of Cu-based binary alloys. *Journal of Physical Studies*, 27(1) (2023) 1601 [6 pages]. doi: 10.30970/jps.27.1601.

14. V. Poverzhuk, Yu. Plevachuk, L. Romaka. Electrophysical properties of the Cu–Pb subsystem of Bi–Cu–Ga–In–Sn–Pb high-entropy alloys. *Вісник Львівського університету. Серія фізична*. 2023. Випуск 60. С. 157–165. doi: 10.30970/vph.60.2023.157.

15. B. Reiplinger, Y. Plevachuk, J. Brillo. Surface tension of liquid Ti, V and their binary alloys measured by electromagnetic levitation. *Journal of Materials Science*. 57 (2022) 21828–21840. doi: 10.1007/s10853-022-07995-y.

16. A. Yakymovych, Yu. Plevachuk, L. Orovčík, P. Švec Sr. Nanocomposite SAC Solders: the Effect of Heat Treatment on the Morphology of Sn-3.0Ag-0.5Cu/Cu Solder Joints Reinforced with Ni and Ni-Sn Nanoparticles. *Applied Nanoscience*, 12 (2022) 977–982. doi: 10.1007/s13204-021-01750-6.

17. Ю. Плевачук, О. Ткач, М. Дуфанець, В. Повержук. Електропровідність розплавів Sn–Ag–Cu з нанорозмірними керамічними домішками. *Вісник Львівського університету. Серія фізична*. 2022. Випуск 59. С. 42–52. doi: 10.30970/vph.59.2022.42.

4.15 Перехід Фредерікса в фероелектричному нематичному рідинному кристалі

Н.С. Арясова^{1,2}, О.Г. Булуй^{1,2}, О.В. Курочкін^{1,2}, В.Г. Назаренко^{1,2},
Б. Баснет³, С. Паладугу³, С. Шияновський³, О. Лаврентович³

¹ Інститут фізики НАН України

² Інститут фізичної хімії ПАН

³ Кентський державний університет, США

Індукована електричним полем зміна молекулярної орієнтації, яка називається переходом Фредерікса, є фундаментальним електрооптичним явищем у неполярних нематичних рідинних кристалах. У фероелектричному нематичному зі спонтанною електричною поляризацією P такий перехід вважався забороненим, оскільки він створює зв'язані електричні заряди зі щільністю $\rho = -\operatorname{div} P$.

Було встановлено, що під дією змінного електричного поля поляризація набуває стаціонарних спотворень, спочатку розвиваються деформації *splay* та *twist* у вигляді полосових доменів, а при більших напругах реалізуються у вигляді квадратної ґратки дефектів $+1$ та -1 . Виникнення цих стаціонарних деформацій зумовлене балансом діелектричного та пружного моментів рідинного кристалу. У полосових доменах *splay-twist* деформація має геометричне рішення з компенсацією $\operatorname{div} P$ та пов'язаного з ним зв'язаного заряду: *splay* у вертикальній площині $\partial P_z / \partial z$, викликаний зовнішнім електричним полем, нівелюється деформацією в іншій площині $\partial P_y / \partial y$ протилежної полярності, так, що $\partial P_y / \partial y + \partial P_z / \partial z \rightarrow 0$.

I. V. Basnet, S. Paladugu, O. Kurochkin, O. Buluy, N. Aryasova, V. Nazarenko, S. Shiyonovskii & O. Lavrentovich, “Periodic splay Fréedericksz transitions in a ferroelectric nematic”, Nature Communications **16**, 1444 (2025).

4.16 Полярна самоорганізація фероелектричних нематичних рідиннокристалічних молекул на атомарно плоскій поверхні Au(111)

О. Марченко^{1,2}, А. Сененко^{1,2}, Я. Лопатіна^{1,2}, В. Назаренко^{1,2},
К. Назаренко³, О. Капітанчук⁴, Н. Катсоніс⁵, О. Лаврентович⁶

¹ Інститут фізики НАН України

² Інститут фізичної хімії ПАН

³ Інститут органічної хімії НАН України

⁴ Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН
України

⁵ Університет Грьонінгена, Нідерланди

⁶ Кентський державний університет, США

Представлено перше пряме спостереження полярного молекулярного впорядкування в моношарі фероелектричних нематичних (NF) мезогенів, що різьє контрастує з поведінкою звичайних нематиків. Молекули звичайних нематиків, адсорбовані на атомарно плоских кристалічних поверхнях, демонструють неполярне впорядкування, навіть якщо вони несуть значний електричний дипольний момент, як у випадку ціанобіфенілів, Рис. 4.16.1(d). Однак, молекули фероелектричного нематичного D1O, адсорбовані на поверхні Au(111), демонструють високий ступінь полярного впорядкування, Рис. 4.16.1(b). Молекули D1O зміщуються одна відносно одної вздовж осі орієнтації, так що 2D моношар нагадує смектик C, в якому молекули всередині шарів нахилені. Експерименти підтверджують модель фероелектричного нематичного впорядкування, в якій синполярні молекули електростатично притягуються одна до одної в положеннях «поруч» завдяки хвилі чергування позитивних і негативних електричних зарядів вздовж молекул. Необхідно зауважити, що хвилі змінних зарядів вздовж молекулярних осей дозволяють електростатичне притягання аналогічно заряджених біомолекул, таких як нуклеїнові кислоти, в іонному середовищі. Полярно впорядковані моношари NF демонструють надзвичайно тонкий форм-фактор, що робить їх потенційно важливими для нових органічних мікроелектронних та наноелектронних застосувань. Загалом, самоорганізація є ключовим процесом у багатьох наукових і технологічних галузях, і розуміння того, як сегнетонематичні молекули

4.16. Полярна самоорганізація рідиннокристалічних молекул

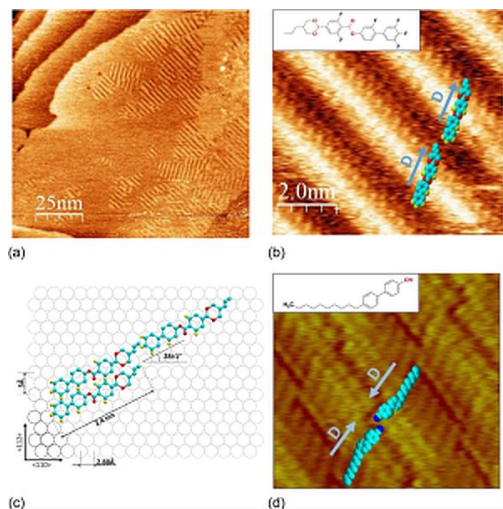


Рис. 4.16.1: (а) СТМ-зображення мономолекулярної плівки DIO на поверхні Au(111). (б) Зображення високої роздільної здатності адсорбованих молекул DIO. Схематичне положення адсорбованих молекул. Молекулярні диполі D орієнтовані в одному напрямі. (с) Схематичне розташування молекул DIO на поверхні Au(111) з оптимізованою енергією взаємодії з решіткою Au. (d) Самоорганізований моношар мезогенних молекул 10CB на поверхні Au(111) з упаковкою «голова до голови».

кули організуються на поверхнях, є важливим для розвитку фундаментальних знань та розробки нових матеріалів.

1. Alexandr A. Marchenko, Oleksiy L. Kapitanchuk, Yaroslava Yu. Lopatina, Kostiantyn G. Nazarenko, Anton I. Senenko, Nathalie Katsonis, Vassili G. Nazarenko, and Oleg D. Lavrentovich, Polar Self-Organization of Ferroelectric Nematic-Liquid-Crystal Molecules on Atomically Flat Au(111) Surface. *Physical Review Letters* 132, 098101 (2024). doi: 10.1103/PhysRevLett.132.098101

4.17 Динаміка рідкокристалічних колоїдів

Б.І. Лев¹, О.М. Товкач², С.Б. Чернишук³

¹ Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України 03143 Київ, вул. Метрологічна, 14-Б

² Університет Джорджтауна, фізичний факультет, Вашингтон, ДК, 20057, США

³ Інститут фізики НАН України, 03028 Київ, проспект Науки, 46

Побудована теорія поведінки макрочастинок у деформованому полі директора. Показано виникнення деформаційного монополю заряду у викривленому полі директора. Базуючись на теоретичних представленнях, теоретично пояснено співіснування двох термодинамічно стійких гексагональних структур у системі гліцеринових крапель на межі розділу рідкий кристал – повітря (Рис. 4.17.1). Експериментально спостерігалось співіснування двох структур (звичайної гексагональної і щільно упакованої), які формують гліцеринові краплини на межі рідкого кристалу і повітря (експерименти виконані В.Г. Назаренком). Крім того теоретично та експериментально вивчалася динаміка колоїдних частинок у деформованому пружному полі директора.

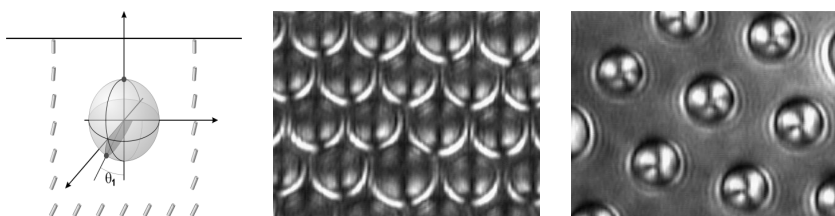


Рис. 4.17.1: Система гліцеринових крапель на межі розділу рідкий кристал – повітря.

1. Tovkach, O.M., Chernyshuk, S.B., Lev, B.I. (2022). Colloidal Particles in Confined and Deformed Nematic Liquid Crystals: Electrostatic Analogy and Its Implications. In: Bulavin, L., Lebovka, N. (eds) Soft Matter Systems for Biomedical Applications. Springer Proceedings in Physics, vol 266. Springer, Cham. doi: 10.1007/978-3-030-80924-9_5

4.18 Динаміка рефрактивного індексу в моношарах Ленгмюра

Б.І. Лев, А.П. Ребеш

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН
України 03143 Київ, вул. Метрологічна, 14-Б

Моношари Ленгмюра часто використовуються як модельні системи; їх теоретичне дослідження наразі є надзвичайно актуальним і вони мають різноманітне практичне застосування. За керованої міжмолекулярної організації на мономолекулярних плівках можна точно визначити поверхневий тиск, поверхневий потенціал та інші величини. Однак деякі фізичні величини, такі як показник заломлення моношару, або рефрактивний індекс все ще залишаються малодослідженими. Рефрактивний індекс є важливою величиною, зокрема, через те, що за його допомогою (разом із іншими величинами) можна визначати товщину плівки. В експериментах світлоіндуковані ефекти молекулярних реорієнтацій спостерігалися разом із деформаціями поверхні плівки, спричиненими зміною орієнтації та форми молекул, а також багатьма іншими факторами, які не були враховані раніше. Але, в основному, фізичною природою спостережуваного явища є, очевидно, вплив світла на молекулярні конформаційні перехо-

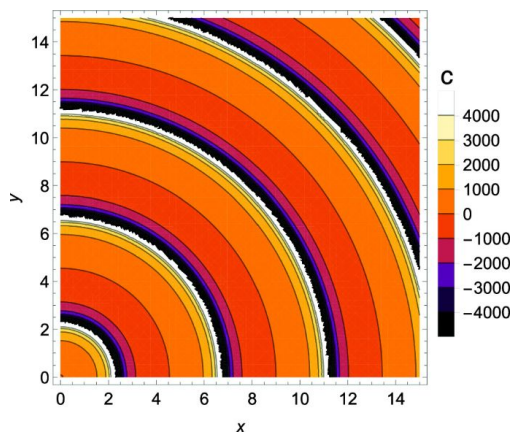


Рис. 4.18.1: Поступова зміна рефрактивного індексу в моношарі.

4. Основні результати

ди, що, в свою чергу, приводить до зміни орієнтації молекул і деформації плівки. Результат впливу цих факторів спостерігається як локальна зміна рефрактивного індексу; зміна рефрактивного індексу відбувається не в фіксованому місці, а поступово в моношарі (подібно руху хвилі).

1. A.P. Rebesh and B.I. Lev. Dynamics of the Refractive Index in Langmuir Monolayers. *Eur. Phys. J. E* 45:23 (2022). doi: 10.1140/epje/s10189-022-00179-1

4.19 Наноструктурування в нематичних рідкокристалічних системах

П.В. Ващенко, Л.М. Лисецький

Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України,
пр. Науки, 60, 61072 Харків, Україна, e-mail: lcscefox@gmail.com

В проведеній нами серії робіт [1,2] було виявлено, що внесення до нематичного рідкого кристалу 4-пентіл-4'-ціанобіфенілу (5CB) певних немезогенних речовин (зокрема, саліцилальдоксиму та резорцинолу), викликає істотне підвищення температурної стабільності нематичної мезофази, в суперечності до загальноприйнятих теоретичних уявлень про дію немезогенних допантів на рідкокристалічні системи. Проаналізовано специфічні міжмолекулярні взаємодії, що зумовлюють ці аномалії, із залученням низки методів (ДСК, FTIR, UV-Vis спектроскопія в розведених розчинах і в мезофазі, квантово-хімічні розрахунки). Поряд із відносно дослідженим впливом водневих зв'язків, що призводять до утворення молекулярних комплексів з ефективною анізотрією, більшою, ніж у молекул висхідних компонентів, значну роль відіграють також диполь-дипольні взаємодії та стеричні фактори, що сприяють пакуванню сусідніх молекул у певні структури, які можуть розглядатися як індуковані наночастинки. Ці результати доповнюють уявлення про наноструктурування в рідких кристалах, яке може реалізовуватися як через внесення наночастинок, так і через внутрішні "bottom-up" процеси.

1. P.V. Vashchenko e.a., *J. Mol. Liq.*, V. 432, 2025, 127838, doi: 10.1016/j.molliq.2025.127838

2. P.V. Vashchenko e.a., *Func. Mat.*, V. 32, No. 4, 2025, p. 553–561, doi: 10.15407/fm32.04.553

4.20 Модельні ліпідні мембрани як об'єкти молекулярної фізики: структурування під дією фармпрепаратів

Р.Є. Бродський¹, О.В. Ващенко²

¹ Інститут монокристалів НАНУ, пр. Науки 60, 61072 Харків, Україна, e-mail: r.brodskii@gmail.com

² Інститут скінтіляційних матеріалів НАНУ, пр. Науки 60, 61072 Харків, Україна, e-mail: olga_v@isma.kharkov.ua

Модельне ліпідне середовище — шарувата наноструктура, утворена амфіфільними молекулами ліпідів у водній субфазі. Такі середовища подібні до клітинних мембран людини та тварин, тому широко використовуються в модельних біофізичних та біомедичних дослідженнях, зокрема для вивчення дії лікарських засобів.

В рамках розроблюваного підходу отримано наступні результати.

- Показано можливість спонтанного розділення моноліпідної мембрани на нанорозмірні домени (площею 300–30000 нм²) у присутності деяких лікарських речовин, що може становити один зі шляхів біологічної дії лікарських засобів [1,2].
- Розроблено комплекс програм та методик, які дозволяють чисельне визначення якісних та кількісних характеристик нанорозмірних доменів, утворюваних у ліпідних мембранах внаслідок одночасної реалізації двох мод зв'язування лікарської речовини [2,3].
- Запропоновано спосіб визначення впливу компонентів лікарського препарату на його біофармацевтичні властивості [4].
- За допомогою вказаного способу оптимізовано склад седативного препарату на основі гліцину та триптофану, ефективність якого доведено фармакологічними дослідженнями [5].

1. R.Ye. Brodskii, O.V. Vashchenko. *Func. Mater.*, 2023; Vol. 30 (3): 413–423. doi: 10.15407/fm30.03.413

2. R.Ye. Brodskii, O.V. Vashchenko. *Func. Mater.*, 2024; 31 (4): 561–573. doi: 10.15407/fm31.04.561

3. R.Ye. Brodskii, O.V. Vashchenko. *J. Struct. Biol.*, 2025, Vol. 217, Iss. 3, Article 108226. doi: 10.1016/j.jsb.2025.108226

4. Ващенко О.В. Патент 156059 від 09.05.2024.

5. O.V. Vashchenko, R.Ye. Brodskii, e.a. *Eur. J. Pharm. Biopharm.*, 2024, V. 203. Article 114469. doi: 10.1016/j.ejpb.2024.114469

4.21 Особливості агрегації ціанінових барвників у рідкокристалічному середовищі

О.М. Самойлов, С.С. Гранкіна, О.В. Сорокін, Л.М. Лисецький

Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України,
відділ наноструктурних матеріалів імені Ю.В. Малюкіна,
просп. Науки, 60, 61072 Харків, Україна, e-mail:
samoilovisma@gmail.com

Люмінесцентні рідкі кристали є перспективними функціональними матеріалами для сучасної оптоелектроніки, що поєднують оптичне випромінювання з анізотропним порядком та електрооптичною керованістю. Практична реалізація таких систем суттєво ускладнюється проблемою неконтрольованої агрегації допантів у рідкокристалічних (РК) матрицях, що порушує однорідність композиту та призводить до гасіння флуоресценції. Ефективним підходом до подолання цієї проблеми є використання J-агрегатів — низькорозмірних супрамолекулярних структур, що характеризуються делокалізованими екситонами, які забезпечують інтенсивне та спектрально вузьке випромінювання. Досліджено процеси самоорганізації та взаємодії J-агрегатів двох ціанінових барвників — аніонного TDVC та катіонного PIC — у нематичній матриці 5CB.

Аналіз спектральних характеристик дисперсій показав, що впровадження агрегатів у РК-матрицю суттєво змінює їхні оптичні властивості порівняно з водними розчинами. Зокрема, спостерігається помітне розширення J-смуг поглинання, червоний зсув смуг люмінесценції, а також різке зростання інтенсивності мономерного поглинання. Ці явища свідчать про зниження загального ступеня агрегації та підвищення рівня структурного безладу під впливом пружно-орієнтаційних сил нематичного середовища. Розрахунки екситонної довжини когерентності за двома незалежними моделями підтвердили її значне скорочення в матриці 5CB. Найбільш радикальні спектральні зміни зафіксовано для катіонного барвника PIC, що пояснюється його вищою розчинністю в досліджуваному рідкому кристалі. Зменшення довжини когерентності для PIC вказує на

розпад великих молекулярних кластерів та індуковане анізотропним середовищем формування найменших можливих супрамолекулярних одиниць — «косих димерів» (*oblique dimers*), що нетипово для водних систем.

Попри зниження загального квантового виходу люмінесценції в РК-матриці (до 10% для TDBC та 5% для PIC), досліджені гібридні системи продемонстрували унікальні динамічні характеристики збуджених станів. Так, J-агрегати TDBC виявили майже десятикратне збільшення середнього часу життя люмінесценції (від $\sim 0,13$ нс у воді до $\sim 1,19$ нс у РК) [1]. З огляду на мізерний внесок флуоресценції ізольованих мономерів, таке безпрецедентне подовження свідчить про глибоку зміну екситонної динаміки: ефективне придушення каналів безвипромінювальної релаксації та встановлення нетипово довгого радіаційного часу життя. Найбільш фундаментальним практичним результатом роботи є виявлення ефекту аномального покращення фотостабільності J-агрегатів у нематичному оточенні. В умовах безперервного лазерного опромінення у водному середовищі емісія агрегатів повністю зникла за 4–12 хвилин, тоді як у матриці 5CB інтенсивність їхньої люмінесценції знижувалася лише на $\sim 10\%$ навіть після кількох годин безперервної експозиції.

Окрім впливу середовища на допанти, було проаналізовано зворотний вплив впроваджених супрамолекулярних структур на макроскопічні властивості самої матриці. Встановлено, що присутність J-агрегатів практично не порушує базовий орієнтаційний порядок нематичної фази, проте цілеспрямовано модифікує її електрооптичний відгук. У легованих зразках порогова напруга переходу Фредерікса дещо зростає порівняно з чистою матрицею 5CB, однак сам процес структурної переорієнтації стає значно різкішим. Таке загострення вольт-контрастної характеристики є критично важливим для практичного застосування, оскільки створює передумови для суттєвого підвищення оптичного контрасту в дисплейних пристроях. У підсумку, отримані результати доводять перспективність інтеграції J-агрегатів у нематичні рідкі кристали. Отримані гібридні системи не лише дозволяють тонко модулювати екситонні процеси випромінювачів, а й відкривають нові шляхи для розробки високоефективних люмінесцентних матеріалів із покращеними показниками фотостабільності та оптимізованими електрооптичними властивостями.

1. Grankina, I. I., Samoilov, O. M., Kasian, N. A., Ropakova, I. Yu., et al.: Spectral features of the dispersion of carbocyanine dye J-aggregates in a liquid crystal matrix. *Opt. Mater. Express* 13, 1741 (2023). doi: 10.1364/OME.491678

4.22 Рідкокристалічна щітка як орієнтуюча поверхня для рідких кристалів

Д. Яремчук¹, Т. Пацаган^{1,2}, Я. Ільницький^{1,2}

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1, e-mail: iln@icmp.lviv.ua

² Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

Фоточутливі поверхні з рідкими кристалами використовуються як керуючі поверхні, що індукують впорядкування в об'ємній фазі, у дисплеях, розумних матеріалах, біоповерхнях, формуванні мікрорельєфів та запису інформації. Полімерні щітки стабілізують або руйнують рідкокристалічні фази мезогенів, що дуже важливо для багатьох згаданих застосувань. Використовуючи метод огрубленої молекулярної динаміки, розглянуто полімерну щітку з бічними хромоформними групами типу азобензенів. За нормальних умов вони знаходяться у гідрофобному стані *trans*, а під дією ультрафіолетового випромінювання переходять у полярний стан *cis*. Модельовано такий перехід, змінюючи потенціал із притяганням на потенціал лише з м'яким відштовхуванням для пар сфероциліндричних хромофорів. Для *cis* азобензенів розраховано [1] параметри порядку $S_\alpha = \langle P_2(\cos \theta_\alpha) \rangle$, де $\alpha \in \{x, y, z\}$, а θ_x — кут між віссю директора хромофора та ОХ. Зростання густини прищиплення дозволяє отримати орієнтацію хромофорів, перпендикулярну до ОZ, без впорядкування у ХУ площині. Для *trans* азобензенів і високих густин прищиплення азобензени орієнтовані перпендикулярно ОZ, а у площині ХУ формують домени певної орієнтації. Імітуючи опромінення поляризованим світлом, що динамічно орієнтує азобензени, застосовано впорядковуюче поле з $U^{\text{ROT}} = F \sum_{i=1}^{N_t} P_2(\cos \theta_{i,p})$, де кут $\theta_{i,p}$ між напрямом поляризації та директора хромофора, N_t — кількість транс азобензенів. Показано можливість формування, таким чином, одновісної планарної фази, що залишається стабільною для різних температур.

1. D. Yaremchuk, T. Patsahan, J. Ilnytskyi, Photo-switchable liquid crystalline brush as an aligning surface for liquid crystals: modelling via mesoscopic computer simulations, *Condensed Matter Physics* 25 (3) (2022) 33601. doi: 10.5488/cmp.25.33601

4.23 Впорядкування рідкокристалічних наночастинок в об'ємі та розчиннику

А. Слюсарчук¹, Д. Яремчук², Ю. Лінтуворі³, М.Р. Вілсон⁴, М. Грензер⁵, С. Соколовський⁶, Я. Ільницький^{1,2}

¹ Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

² Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1, e-mail: iln@icmp.lviv.ua

³ Univ. Bordeaux, CNRS, LOMA, UMR 5798, F-33400 Talence, France

⁴ Department of Chemistry, Durham University, University Science Laboratories, Lower Mountjoy, Stockton Road, Durham, DH1 3LE, UK

⁵ Leibniz Institute of Polymer Research, 01069 Dresden, Germany

⁶ Department of Theoretical Chemistry, Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, 20031 Lublin, Poland

Здійснено огляд [1] досліджень впорядкування наночастинок із рідкокристалічними лігандами (LCNP) в рамках комп'ютерних симуляцій. Показано, що деякі однодомні фази можна вирощувати, змінюючи густину лігандів та застосовуючи зовнішні поля, що діють на рідкокристалічні групи (мезогени). Для хромофорних мезогенів, як азобензени, показано, що швидкість утворення фаз можна збільшити дією світлового опромінення певної довжини хвилі та поляризації. В іншому дослідженні розглянуто формування зв'язної мережі LCNP у полярному розчині. Продемонстровано, що властивості мережі сильно залежать від патерну декорування LCNP. Зрештою, також розглянуто адсорбцію LCNP на декорованій бічними лігандами щітці, акцентуючи увагу на характеристики щітки, що оптимізують адсорбцію. Загалом показано здатність огрублених моделей у комп'ютерних симуляціях відтворювати широкий спектр фізико-хімічних процесів, пов'язаних із впорядкуванням LCNP.

1. A. Slyusarchuk, D. Yaremchuk, J. Lintuvuori, M. R. Wilson, M. Grenzer, S. Sokołowski, J. Ilnytskiy, Aided- and self-assembly of liquid crystalline

nanoparticles in bulk and in solution: computer simulation studies, *Liquid Crystals* 50 (1) (2023) 74–97. doi: 10.1080/02678292.2023.2169872

4.24 Магнетострикція еластомера в наближенні парних взаємодій

Д. Яремчук¹, Д. Іванейко^{3,4}, Я. Ільницький^{1,2}

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1, e-mail: iln@icmp.lviv.ua

² Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

³ Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e. V., Hohe Straße 6, 01069 Dresden, Germany

⁴ Institute of Applied Physics, Technische Universität Dresden, 01062 Dresden, Germany

Визначення відгуку магнеточутливого еластомера на прикладене магнітне поле є важливим з огляду застосувань цих матеріалів як актуаторів, сенсорів, погашувачів вібрацій чи перетворювачів магнітної енергії у механічну. Коли частинки мікронного розміру, вживлені в еластичну матрицю композиту, є магнітом'якими, вони мають лише наведений магнітний момент. Для малих відстаней між частинками вони неоднорідно намагнічують одна одну. Мірою відгуку слугує магнетострикція. Застосовано наближення: i) парних взаємодій між магнітними кульками; ii) деформації еластичної матриці, яка відбувається разом із магнітними частинками афінно. Показано [1], що мікроскопічний вклад у магнетострикцію визначається дипольними взаємодіями більш ніж на 90%, поки об'ємна частка магнітних частинок є меншою за $\phi < 30\%$ для об'ємоцентрованої кубічної ґратки (BCC) і $< 20\%$ для гранецентрованої (FCC), гексагональної (HCP) та простої кубічної ґраток (SC). Виявлено, що для випадків FCC і BCC розподілів магнетострикція додатна, а для SC і HCP — від'ємна. Різниця знаку магнетострикції для FCC і HCP пов'язана з відносними орієнтаціями ґратки і магнітного поля, ілюструючи анізотропію магнетострикції. Вра-

хування неоднорідної намагніченості частинок спричиняє немонотонну залежність магнетострикції від об'ємної частки ϕ .

1. D. Yaremchuk, D. Ivaneyko, J. Ilnytskyi, Magnetostriction in the magneto-sensitive elastomers with inhomogeneously magnetized particles: Pairwise interaction approximation, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 589 (2024) 171554. doi: 10.1016/j.jmmm.2023.171554

4.25 Нелінійна теорія транспорту зарядів у молекулярних донор-акцепторних системах

Л.С. Брижик

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН
України 03143 Київ, вул. Метрологічна, 14-Б

Побудовано нелінійну теорію транспорту зарядів у системах «Донор – Молекулярний ланцюжок – Акцептор» та «Донор – Альфа-спіральна білкова молекула – Акцептор», яка пояснює механізм транспорту електронного заряду на макроскопічні відстані у приладах сучасних нанотехнологій та технологій на основі біомікрії з використанням новітніх низьковимірних функціональних матеріалів цього класу. Такий механізм при відповідних значеннях параметрів системи забезпечується тунелюванням електронів із донора до найближчого кінця квантового дроту, в ролі яких виступає молекулярний ланцюжок або органічний чи неорганічний полімер, з подальшим формуванням електросолітона завдяки електрон-фононній взаємодії у ланцюжку, яка сприяє утворенню потенціальної ями для електрона. У такому автолокалізованому солітонному стані електрон разом із деформацією рухається з мінімальною дисипацією енергії до протилежного кінця молекулярного дроту, звідки він тунелює на молекулу акцептора. Показано що параметри солітона та ефективність електронного транспорту залежать від значень параметрів системи. Знайдено оптимальні значення цих параметрів для найбільш ефективного транспорту та показано, що ця ефективність може сягати 80–90 відсотків навіть для дуже довгих ланцюжків (50–70 вузлів) [1].

Вперше в рамках теорії Дірака отримано точні аналітичні вирази для тривимірних зв'язаних електронних станів у кулонівському полі ланцюжка додатньо заряджених йонів. Знайдено новий спінорний інваріант для цієї задачі. Показано, що в такому підході природним чином виникає

4. Основні результати

зв'язування між спіном електрона та його одновимірним рухом вздовж ланцюжка без будь-якої необхідності штучним способом вводити у відповідні рівняння руху додаткову так звану спін-орбітальну взаємодію [2].

Встановлено особливості руху електросолітонів, що є особливим видом заряджених поляронів великого радіусу в низьковимірних молекулярних системах, у зовнішньому змінному у часі магнітному полі. Показано, що в періодичному у часі магнітному полі динаміка електросолітонів істотно залежить від орієнтації поля. Розраховано хвильові функції солітона у двох випадках, коли поле паралельне молекулярним ланцюжкам та перпендикулярне. У першому випадку динаміка солітона є суперпозицією динаміки гармонічного осцилятора у зовнішньому періодичному магнітному полі у площині, перпендикулярній до ланцюжків, та руху вільного солітона вздовж ланцюжка. У перпендикулярному магнітному полі динаміка солітона є суперпозицією плоских хвиль у площині, перпендикулярній до ланцюжків, та поздовжнього руху солітона з параметрами, що залежать як від амплітуди, так і частоти зовнішнього поля. Розраховано швидкість солітона і показано, що вона є змінною у часі та містить гармоніки з частотою поля та кратними частотами. Це зумовлює випромінювання солітоном звукових та електромагнітних хвиль. Такі динамічні властивості солітона впливають на процеси транспорту зарядів у електропровідних низьковимірних сполуках та в окислювально-відновлювальних процесах в біологічних системах. На основі результатів вивчення впливу магнітних полів на динаміку Давидовських солітонів у білкових макромолекулах розвинуто теорію нетеплового резонансного впливу змінних у часі магнітних полів на біологічні системи, що пояснює механізм їх терапевтичної дії, що широко застосовується в медицині [3,4].

Показано, що вплив електричних та магнітних полів на солітонний механізм транспорту енергії та зарядів у біологічних системах може мати фізіологічні наслідки, що підтверджується незалежними даними медичних досліджень із застосуванням терапевтичних методів із використанням йонних циклотронних частот [5].

Встановлено можливість утворення солітон-подібних станів у квазідво-вимірних сильно анізотропних молекулярних системах. Показано, що такі матеріали описуються системою зв'язаних рівнянь, які включають нелінійне рівняння Шредінгера та рівняння Кадомцева–Петвіашвілі II роду. Знайдено розв'язки цих систем рівнянь та показано існування нелінійних локалізованих мод у вигляді стійких зв'язаних електрон-фононних станів для широкого інтервалу значень параметрів системи. Ці результа-

ти пояснюють ефективний електронний транспорт в ангармонічних квазідовимірних сильно анізотропних системах, що використовуються у сучасних нанотехнологіях [6].

1. L.S. Brizhik. Fifty years of the Davydov's soliton. *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2024. (3): 102–106. doi: 10.15407/visn2024.03.102
2. Alexander Eremko, Larissa Brizhik, Vadim Loktev. Bound electron states in a charged chain within the Dirac description. *Low Temp. Phys.* 51, 680–687 (2025) doi: 10.1063/10.0036744
3. L. Brizhik. Dynamics of the Davydov's soliton in external oscillating magnetic field. *Chaos, Solitons and Fractals* 187 (2024) 115459. doi: 10.1016/j.chaos.2024.115459
4. L. Brizhik. Known and less known about the Wave of Translation, Davydov's soliton and its dynamics in an oscillating magnetic field. *Low Temp. Phys.* 51, 655–664 (2025) doi: 10.1063/10.0036611
5. Liguori, A., Brizhik, L., Liguori, S., Silli, L., Bangrazi, S., Petti, F., Pinti, M., Pistelli M.I., Giuliani, L. Effects of Ion Cyclotron Frequencies on Human Resistance and Reactance in 31 Healthy Subjects. *Radiation* 2022, 2, 357–375. doi: 10.3390/radiation2040027
6. Luis A. Cisneros-Ake, Larissa Brizhik, Julian T. Becerra-Sagredo, M.G. Velarde. Nonlinear charge and energy transport in anharmonic quasi-two-dimensional systems. *Phys.Rev. E*, 109, 024207 (2024). doi: 10.1103/PhysRevE.109.024207

4.26 Властивості форми асиметричних пом-пом полімерів у хорошому розчиннику

Х. Гайдуківська¹, О. Калюжний¹, В. Блавацька¹, Я. Ільницький^{1,2}

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1, e-mail: iln@icmp.lviv.ua

² Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

Виконано дослідження конформаційних властивостей асиметричних макромолекул типу пом-пом у розведеному розчині [1]. Розглянуто випадок, коли функціональності двох кінцевих центрів галуження є різними,

4. Основні результати

що дає змогу простежити вплив топологічної асиметрії на розміри, форму та просторову організацію макромолекули. Для аналізу використано поєднання аналітичного підходу на основі прямого полімерного перенормування і чисельного моделювання методами дисипативної динаміки та Монте-Карло.

Обчислено набір універсальних безрозмірних характеристик, що описують ефективний розмір асиметричних пом-пом структур порівняно з лінійними ланцюгами, зірковими та симетричними пом-пом полімерними структурами тієї ж молекулярної маси. Додатково введено фактор асиметрії та характеристику зміщення центра мас центрального ланцюга. Показано, що асиметрія архітектури приводить до збільшення ефективного розміру молекули та суттєво впливає на її конформаційні властивості. Отримані результати підтверджують універсальний характер цих характеристик і демонструють важливу роль ефектів виключеного об'єму в описі асиметричних пом-пом полімерів.

1. K. Haidukivska, O. Kalyuzhnyi, V. Blavatska, J. Ilnytskyi, *Condens. Matter Phys.* – 2022. – Vol 25. No. 2, 23302: 1–18. doi: 10.5488/CMP.25.23302

4.27 Про властивості набухання пом-пом полімерів у розведених розчинах: симетричний випадок

Х. Гайдуківська¹, О. Калюжний¹, В. Блавацька¹, Я. Ільницький^{1,2}

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1, e-mail: iln@icmp.lviv.ua

² Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

Досліджено конформаційні властивості розгалуженої макромолекули типу пом-пом у розведеному розчині [1]. Така макромолекула складається з центрального лінійного ланцюга, на кінцях якого знаходяться дві точки галуження з однаковими кількостями гілок. Увагу приділено універсальним характеристикам форми та розміру, що визначаються топологією макромолекули, просторовою розмірністю та якістю розчинника.

Для аналізу поєднано теоретичний підхід на основі неперервної моделі Едвардса та прямого полімерного перенормування з комп'ютерним

моделюванням методом дисипативної динаміки. Обчислено універсальні співвідношення, що характеризують розміри, компактність, розтягнення та асферичність як усієї макромолекули, так і її окремих гілок. Показано, що зі зростанням ступеня розгалуження суттєво змінюються просторові характеристики пом-пом полімерів. Для більшості розглянутих величин отримано добру узгодженість між теоретичними та чисельними результатами, що підтверджує продуктивність концепції універсальності для опису властивостей розгалужених полімерів.

1. K. Haidukivska, O. Kalyuzhnyi, V. Blavatska, and J. Ilnytskyi, *J. Mol. Liq.*, 2021, vol. 328, p. 115456; doi: 10.1016/j.molliq.2021.115456

4.28 Про форму Гаусових безмасштабних полімерних мереж

В. Блавацька^{1,2}, Ю. Головач¹⁻⁴

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Співпраця \mathbb{L}^4 і Докторський коледж 'Статистична фізика складних систем', Ляйпціг-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа

³ Complexity Science Hub Vienna, 1080 Vienna, Austria

⁴ Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry CV1 5FB, UK

Розглянуто модель складних гіперрозгалужених полімерних структур, сформованих на основі безмасштабних графів [1]. Для таких графів розподіл функціональностей (ступенів) k вузлів спадає за степеневим законом $p(k) \sim k^{-\alpha}$. Такі полімерні топології можна розглядати як узагальнення регулярних ієрархічних дендримерних структур із фіксованими функціональностями. Конформаційні характеристики розміру та форми, такі як усереднена асферичність $\langle A \rangle$ та співвідношення розмірів g полімерних мереж, отримані чисельно за допомогою методу Вея. В цьому методі конфігурація будь-якої складної гаусової мережі описується спектрами власних значень відповідної матриці Кірхгофа. Отримані кількісні результа-

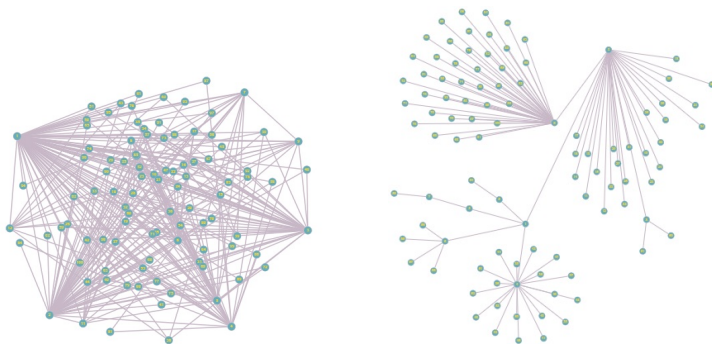


Рис. 4.28.1: Типові зразки безмасштабних мереж у нашій роботі: конфігураційна модель (ліворуч), дендримерна модель (праворуч).

ти вказують, зокрема, на збільшення компактності та симетрії мережевих структур зі зменшенням параметра α .

1. V. Blavatska, Yu. Holovatch. On the shape of Gaussian scale-free polymer networks. *J. Phys.: Cond. Matt.* 37 (2025) 145101.

doi: 10.1088/1361-648X/adb4b6

4.29 Коагуляційно-флокуляційні процеси на ґратках: моделювання методом Монте-Карло

В. Блавацька¹, Я. Льницький¹, Е. Лахдеранта²

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Фізичний факультет, Школа інженерних наук, Університет LUT, FI-53850 Лаппеенранта, Фінляндія

Коагуляційно-флокуляційні фізико-хімічні процеси, що включають полімерні макромолекули, широко використовуються у процесах очищення розчинів від домішок як органічної, так і неорганічної природи. У роботі [1] проводилось моделювання на основі нетривіального процесу дифузійно-обмеженої агрегації (DLA) із N_{DLA} частинок-домішок, який описує їх коагуляцію, що відбувається з ймовірністю $0 < p \leq 1$.



Рис. 4.29.1: Процес DLA (частинки показані синіми символами) на полімерному флокулянті (червоні символи) з ймовірностями адсорбції $p = 1.0$ (a) та $p = 0.1$ (b).

DLA дифундуючих частинок доповнюється їх незворотною адсорбцією на полімерних макромолекулах масою N_{SAW} , що служать флокулянтами (Рис. 4.29.1). Досліджено динаміку утворення складних агломератів «полімер-адсорбовані частинки» та отримано оцінки, зокрема, для абсолютної N_a та відносної n_a ефективності адсорбції в широкому діапазоні параметрів $\{p, N_{DLA}, N_{SAW}\}$.

1. Blavatska V., Plynyskyi Ja., Lähderanta E. // J. Phys. A. – 2024. – Vol. 57, no. 31 – P. 315002 (1–18). doi: 10.1088/1751-8121/ad5e4d

4.30 Характеристики розміру та форми полімерів топології «сніжинка» в хороших розчинниках

К. Гайдуківська¹, В. Блавацька¹, Я. Патурей^{1,2}

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Інститут фізики, Університет Сілезії, 41-500 Катовіце, Польща

Прогрес у хімії полімерів дозволяє синтезувати складногалужені структури із нетривіальними реологічними властивостями. Приклад такої структури, а саме сніжинкоподібноподібні макромолекули (з функціональністю центрального ядра f_s і бічним розгалуженням f), було розглянуто у роботі [1]. Для аналізу конформаційних властивостей використо-

4. Основні результати

увались як аналітичні методи, так і чисельне моделювання молекулярної динаміки. Ці методи дозволили оцінити характеристики розміру та форми полімеру-сніжинки як функції f та f_s . Результати демонструють ефективну компакфікацію типової полімерної конформації зі збільшенням кількості точок розгалуження. Загалом проведені дослідження кількісно прояснюють питання впливу параметрів розгалуження на загальну компактність галужених макромолекул.

1. Haydukivska K., Blavatska V., Paturaj Ja. // J. Mol. Liq. – 2023. – Vol. 392, No. 1. – P. 123430. doi: 10.1016/j.molliq.2023.123430

4.31 Вживання в двовидовій реакційно-супердифузивній системі: ренормгруповий підхід та числове моделювання

Д. Шаповал, В. Блавацька, М. Дудка

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

У роботі [1] проаналізовано двовидову реакційно-дифузійну систему, де беруться до уваги як реакції захоплення $A + B$, так і реакції коагуляції/анігіляції $A + A \rightarrow (A, 0)$, де частинки обох видів рухаються згідно статистики Леві з параметром керування $0 < \sigma < 2$, що призводить до супердифузійної поведінки. Відомо, що густина, а також кореляційна функція для цільових частинок B у таких системах масштабуються з нетривіальними універсальними показниками. Застосовуючи як аналітичний підхід в рамках формалізму ренормгрупи, так і чисельне моделювання, отримано значення цих показників у режимі супердифузії. Зокрема, виявлено, що ймовірність виживання цільових частинок у режимі супердифузії вища, ніж у системі зі звичайною дифузією.

1. Shapoval D., Blavatska V., Dudka M. // Journal of Physics A. – 2022. – Vol. 55, no. 45 – P. 455002 (1–22). doi: 10.1088/1751-8121/ac9c39

4.32 Застосування підходів статистичної фізики до задач про еволюцію біологічних популяцій

В. Блавацька¹, Б. Вацлав²

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Інститут фізичної хімії ПАН, вул. Каспшака 44-52, Варшава, Польща

Визначення часу адаптації (еволюції) біологічних систем і спрямований контроль цих процесів є важливими як з теоретичної, так і з практичної точки зору (для прикладу, в процесах поширення резистентності до антибіотиків у бактерій). У роботі [1] було зосереджено увагу на ролі швидкості мутації у квазівидовій моделі популяцій та застосовано деякі підходи статистичної фізики, для прискорення процесів еволюції у такій моделі. Кожен організм представлено бінарною послідовністю довжини L . Внаслідок процесу реплікації і можливість точкових мутацій, організм може продукувати нащадків із летальними мутаціями з імовірністю γ . Встановлено, що присутність летальних генотипів призводить до суттєвого зменшення середнього часу адаптації популяцій, а отже значно пришвидшує еволюційний процес. Такий же ефект було досягнуто, застосовуючи методи паралельного відпалення та алгоритм Ванга–Ландау, використовуючи аналогію між температурою у спінових феромагнітних моделях та швидкістю мутації у квазівидовій моделі.

1. Blavatska V., Waclaw B. // Phys. Rev. Research. – 2024. – Vol. 6. – P. 013286 (1–8). doi: 10.1103/PhysRevResearch.6.013286

4.33 Індивідуальна упередженість та флуктуації в колективному прийнятті рішень: від алгоритмів до гамільтоніанів

П. Сарканич¹, М. Красницька¹, Л. Гомез-Нава², Ю. Головач¹

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Інститут теоретичної біології, кафедра біології, Берлінський університет Гумбольдта, 10099 Берлін, Німеччина

У роботі [1] розглядається спінова модель для розуміння деяких особливостей колективного прийняття рішень серед вищих організмів, де стан агента описується парою змінних, що відповідають його думці та зміщенню до будь-якого з протилежних значень S_i . Колективне прийняття рішень інтерпретується як наближення до рівноважного стану в рамках нелінійної моделі виборця, що підлягає соціальному тиску та ймовірнісному алгоритму. Розвинено статистичну фізичну інтерпретацію моделі, описуючи її через гамільтоніан взаємодії та шукаючи рівноважний стан шляхом явного обчислення його функції розподілу. Знайдено точні розв'язки для термодинаміки моделі; моделювання також дозволяє вивчити вплив розміру системи та початкових умов на колективне прийняття рішень у системах скінченного розміру, зокрема, щодо збіжності до метастабільних станів.

I. Sarkanych P., Krasnytska M., Gomez-Nava L., Holovatch Yu. // Phys. Biol. – (2023). – Vol. 20. – P. 045005. doi: 10.1088/1478-3975/acdb6e

4.34 Закони скейлінгу в термічній денатурації ДНК

Ю. Головач¹⁻⁴, Ю. Гончар^{1,2}¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Южновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1² Співпраця \mathbb{L}^4 і Докторський коледж 'Статистична фізика складних систем', Ляйпціг-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа³ Complexity Science Hub Vienna, 1080 Vienna, Austria⁴ Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry CV1 5FB, UK

Проаналізовано вплив середовища (якість розчинника [1], структурний безлад [2]) на перехід між денатурованим та зв'язаним станами ДНК та зміни у законах скейлінгу, що керують конформаційними властивостями ланцюгів ДНК. Дослідження проведено на підставі моделі Поланда-Шераги. Застосовуючи методи полімерної теорії поля, розраховано ентропійні показники, пов'язані з розподілом денатурованих петель. Показано, що перехід першого роду додатково посилюється наявністю протяжних непроникних областей у розчиннику, які обмежують кількість конфігурацій макромолекули.

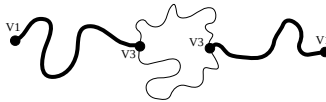


Рис. 4.34.1: Модель термічної денатурації ДНК: дволанцюгова макромолекула з кінцевими точками V1 роз'єднується («розщипається») в точках V3. Отримана гетерогенна полімерна мережа складається з двох подвійних ланцюгів V1–V3 (зв'язані нуклеотидні основи, жирні лінії) та денатурованої одноланцюгової петлі V3–V3 (незв'язані нуклеотидні основи, тонкі лінії). Функція розподілу петлі описується степеневим законом скейлінгу.

1. Yu. Honchar, C. von Ferber, Yu. Holovatch. Variety of scaling laws for DNA thermal denaturation. *Physica A* 573 (2021) 125917.

doi: 10.1016/j.physa.2021.125917

2. Yu. Holovatch, C. von Ferber, Yu. Honchar. DNA thermal denaturation by polymer field theory approach: effects of the environment. *Condens. Matter Phys.* 24 (2021) 33603. doi: 10.5488/CMP.24.33603

4.35 Наноконтейнери для цільової доставки лікарських препаратів

К.Г. Березняк, Є.В. Духопельников, Н.О. Гладковська, Ю.М. Близнюк

Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН
України, вул. Ак. Проскури 12, 61085. Харків, Україна,
e-mail: avshestopalova1@gmail.com

Досліджено процеси завантаження протипухлинного антибіотика доксорубіцину (DOX) на функціоналізовану поверхню суперпарамагнітних наночастинок оксиду заліза Fe_3O_4 (SPION) та його вивільнення у водний розчин ДНК. Унікальні властивості магнітних наночастинок розширюють можливості для їх застосування у керованій доставці ліків. Важливи-

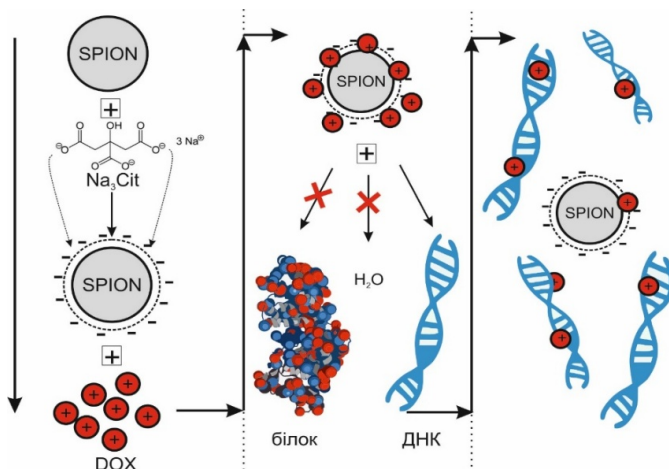


Рис. 4.35.1: Схема модифікації поверхні наночастинок оксиду заліза (SPION), завантаження доксорубіцину (DOX) на поверхню стабілізованих SPION та десорбції DOX в розчин ДНК.

ми для ефективності терапії є характеристики завантаження препарату на носій і процеси його десорбції, яка за таргетної терапії має відбуватися з безпосередньою участю молекул-мішеней, зокрема, ДНК.

У дослідженнях поверхню наночастинок було модифіковано тринатрій цитратом (Na_3Cit), що забезпечило негативний заряд SPION, підвищення колоїдної стійкості водних розчинів та ефективне завантаження позитивно заряджених молекул DOX. У системі SPION–NaCit–DOX одна наночастинка зв'язує до 1270 молекул DOX з високою константою взаємодії. Водночас вивільнення DOX у воду та білкові розчини є незначним. Аналіз ізотерм зв'язування у системах DOX–SPION–ДНК та DOX–ДНК засвідчив, що наночастинки не впливають на взаємодію DOX з ДНК. За високої відносної концентрації ДНК до 90 % молекул DOX вивільняється з поверхні SPION і утворює стабільні комплекси з ДНК. Отримані результати підтверджують перспективність використання SPION як наноконтейнерів для таргетної терапії, що дозволяє досягати терапевтичного ефекту без підвищення дози DOX та зменшувати загальне токсичне навантаження на організм завдяки локалізації дії препарату.

4.36 Дослідження сорбційних властивостей наночастинок шаруватих подвійних гідроксидів Ni_2FeOH у водних суспензіях

К.Г. Березняк, Є.В. Духопельников, Н.О. Гладковська, Ю.М. Близнюк

Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН
України, вул. Ак. Проскури 12, 61085. Харків, Україна,
e-mail: avshestopaloval@gmail.com

Шаруваті подвійні гідроксиди (LDH) є перспективними наноструктурами, що застосовуються як сорбенти та іонообмінні матеріали. Для їх ефективного використання важливими є створення водних суспензій і добір пар LDH–ліганди з високою здатністю зв'язування.

За допомогою ультразвукової диспергації отримано стабільні водні суспензії LDH складу Ni_2FeOH , та розглянуто їхні колоїдні властивості. Методом UV–Vis спектроскопії досліджено взаємодію Ni_2FeOH з лігандами еозином, хлорофіліном і профлавіном. Найвищу ефективність інкапсуляції (~90%) встановлено для системи Ni_2FeOH –еозин. Зв'язування еози-

4. Основні результати

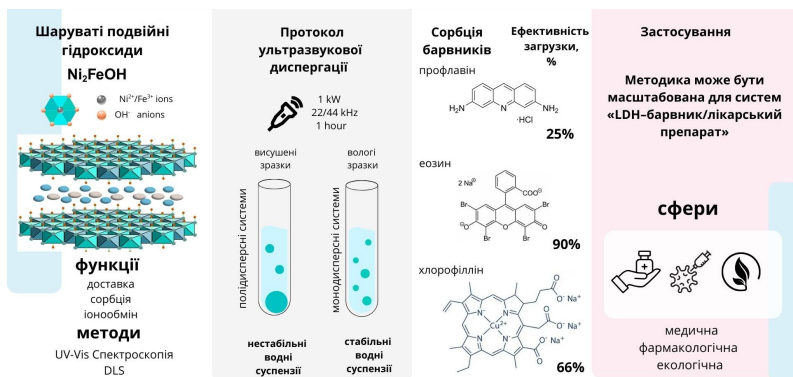


Рис. 4.36.1: Шаруваті подвійні гідроксиди Ni₂FeOH: створення наночастинок, сорбційні властивості у водних суспензіях та медичне застосування.

ну має характер поверхневої адсорбції та супроводжується зменшенням заряду наночастинок і колоїдної стабільності суспензій.

Запропонована методика приготування суспензій LDH, завантаженого барвника та комплексної оцінки взаємодії LDH–ліганд може бути масштабована для систем «LDH–барвник/лікарський препарат», відкриваючи перспективи подальшого застосування LDH у фармакологічній та екологічній сферах.

4.37 Дизайнерські цвітеріонні фосфоліпідні ліганди для метал-галогенідних колоїдних наночастинок

А. Баумкетнер

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

Квантові точки — це нанокристали розміром 5–10 нанометрів, які мають виняткові оптоелектричні властивості. Метал-галогенідні квантові точки — це найбільш перспективний напрямок для цих систем, оскільки вони світяться яскраво та чистим кольором. Пасивуючі ліганди (органічні молекули, які не взаємодіють зі світлом) стабілізують структуру

4.37. Дизайнерські цвітеріонні фосфоліпідні ліганди

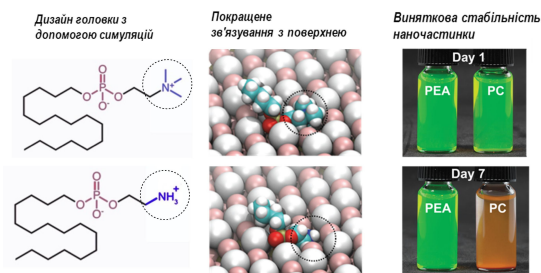


Рис. 4.37.1: Взаємодія ліганда з нанокристалом регулюється хімічною структурою його головки. Рациональний дизайн головки дозволяє контролювати силу зв'язування з поверхнею. Зокрема, комп'ютерне моделювання уможливило побудову головок із надміцним зв'язуванням. Наночастинки, отримані таким чином, демонструють надзвичайну стабільність та стійкість до агресивного середовища, як то полярні розчинники.

квантових точок шляхом взаємодії з поверхнею нанокристалу. Однак, загалом незрозуміло, як саме ці взаємодії відбуваються. Експериментальні дослідження у цьому напрямку утруднені через вимоги атомарної роздільної здатності. Тому для пошуку ефективних лігандів в Інституті фізики конденсованих систем вперше використано атомістичне комп'ютерне моделювання, яке має тут явні переваги. Розглянуто цвітеріонні ліганди (з двома різнозарядженими групами в головці), які краще зв'язуються з поверхнею і мають кращу розчинність. На цій основі запропоновано модифікацію головки [1], що через зменшення розміру головки дозволило покращити силу зв'язування і вийти на унікальні показники стабільності (замість днів — тижні). Крім того, покращено квантовий вихід, а також високу здатність протистояти зануренню у воду чи в інший полярний розчинник. На підставі результатів моделювання такі частинки були синтезовані, що відкрило шлях до багатьох застосувань на їх основі, зокрема як квантових джерел світла.

1. Morad V., Stelmakh A., Svyrydenko M., Feld L. G., Boehme S. C., Aebli M., Affolter J., Kaul C. J., Schrenker N. J., Bals S., Sahin Y., Dirin D. N., Cherniukh I., Raino G., Baumketner A., Kovalenko M. V., Designer phospholipid capping ligands for soft metal halide nanocrystals. *Nature*. 2024. Vol. 626, no. 7999. P. 542–548.

4.38 Багатоцільова *in silico* оптимізація біоактивних сполук за допомогою пошуку по дереву рішень методом Монте-Карло

М. Дручок¹, А. Ровенчак²

¹ Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

² Львівський національний університет ім. І. Франка

У роботі представлено обчислювальний підхід дизайну органічних сполук, що поєднує пошук методом Монте-Карло (англ. Monte Carlo Tree Search, MCTS) із моделями машинного навчання та експертними фармакологічними правилами. Мета дослідження — побудова керованої генерації інгібіторів із селективним або поліфармакологічним профілем щодо низки рецепторів. Як цільові біомішені розглядаються орексинові рецептори OX1R, OX2R та гістаміновий рецептор третього типу H3R, залучені до регуляції сну, апетиту, стресу та пошуку винагороди. У сценарії пошуку селективних інгібіторів метод успішно знаходить нові молекули з високою передбаченою активністю до OX1R і низькою до OX2R і H3R, із бажаними показниками розчинності, токсичності та температури плавлення. Згенеровані структури є хімічно коректними, а низька схожість із відомими інгібіторами підтверджує новизну. Для складнішої задачі поліфармакології (одночасне інгібування OX1R та H3R) також отримано низку кандидатів, що поєднують активність до обох мішеней при мінімальній дії на OX2R. Підхід є універсальним і легко адаптується до інших багатоцільових задач масштабованого пошуку нових сполук із необхідними властивостями.

4.39 Новий метод встановлення адіабатичної швидкості звуку в рідинах з першопринципного комп'ютерного моделювання

Т. Брик

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

Поширення довгохвильових акустичних хвиль у рідинах супроводжується специфічними флуктуаціями локальної температури внаслідок аді-

абатичного стиснення/розширення ділянок хвилі. Це приводить до збільшення макроскопічної швидкості поширення звуку c_s в порівнянні з ізотермічним випадком c_T у $\sqrt{\gamma}$ разів, де γ є співвідношенням теплоємностей при постійному тиску та постійному об'ємі:

$$c_s = \left[\frac{B_s}{\rho} \right]^{1/2} = \left[\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s \right]^{1/2} = \left[\gamma \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T \right]^{1/2} \equiv \sqrt{\gamma} c_T.$$

Тут B_s є адіабатичним об'ємним модулем стиску, а ρ — густиною. В комп'ютерному атомістичному моделюванні є дуже складною задачею встановити макроскопічне значення адіабатичної швидкості звуку через скінчені розміри симульованої системи і необхідність враховувати локальні флуктуації температури навіть у випадку з парними ефективними взаємодіями між атомарними частинками. Коли ж використовується *ab initio* моделювання з явним врахуванням електронної підсистеми в рамках функціоналу густини, то практично неможливо визначити c_s традиційними методами.

Було запропоновано використати мікроскопічні вирази для тензора напружень, які відносно легко розраховуються в *ab initio* моделюванні, та за допомогою яких можна легко обрахувати автокореляційну функцію діагональних компонент тензора напружень $\Psi^L(t)$. В рідинах початкове значення такої автокореляційної функції залежить від різниці квадратів високочастотної c_∞ та адіабатичної c_s швидкостей звуку, що і було використано для встановлення c_s через наступну формулу

$$c_s = \sqrt{c_\infty^2 - \psi^L(0)/\rho},$$

яку можна легко обчислити з *ab initio* моделювання. Були проведені тестові симуляції та обрахунки c_s через запропонований вираз для ряду рідин з використанням класичної молекулярної динаміки. Для надкритичного аргону отримані значення c_s з комп'ютерного моделювання були в дуже доброму узгодженні з експериментальними значеннями з бази даних NIST. Для випадку *ab initio* моделювання було отримано чудове узгодження з експериментальними адіабатичними швидкостями звуку для розплаву Sb та іонного розплаву NaCl. А з *ab initio* моделювання ртуті при критичній температурі вдалось добре узгодити «позитивну дисперсію» звуку з отриманою макроскопічною лінійною дисперсією звуку з коефіцієнтом c_s .

4. Основні результати

1. Taras Bryk, Giancarlo Ruocco, Ari Paavo Seitsonen. Stress fluctuations and adiabatic speed of sound in liquids: a simple way to estimate it from ab initio simulations. *Scientific Reports. vol.13 (2023) 18042.*

4.40 Розвиток інфраструктури: розрахунковий кластер ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України

Т.М. Брик, Т.М. Пацаган

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1

В рамках інфраструктурного проекту Національного фонду досліджень України в Інституті фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського НАН України побудовано та введено в експлуатацію новий обчислювальний кластер з 1632 CPU ядер та 123 тисяч GPU ядер. Архітектура нового обчислювального кластера ІФКС наведена на рисунку нижче. Стандартні тести продуктивності дали показник в 43.9 терафлопс, що робить побудований обчислювальний кластер одним із найпотужніших в

Координуючий вузол:

Motherboard: ASUS RS700A-E12-RS12U
CPU: 2x AMD EPYC 9354P 32C (3.25, 256MB, 280W, SP3)
RAM: 256 Gb DDR5 4800 MHz, ECC

Обчислювальний вузол на CPU (6 nodes)

Motherboard: RS700A-E12-RS12U
CPU: 2x AMD EPYC 9754 128C 2.25 GHz
RAM: 1Tb DDR5-4800, ECC

Обчислювальний вузол на CPU+GPU (3 nodes)

Motherboard: ASUS Pro WS WRX80E-SAGE SE WIFI
CPU: AMD Ryzen Threadripper PRO 5975WX 32-Cores 3.6/4.5 GHz
RAM: 256 GB Kingston KF3200C16D4
GPU: 2x Gigabyte GeForce RTX 4090 24GB GDDR6X WINDFORCE

Система збереження даних - 180 TB RAID6

Платформа: CSE-826BE1C-R920LPB 2U / MBD-X12SPI-TF
CPU: 1x Intel Xeon Silver 4309Y 2.8GHz, 4x32Gb
HDD: 12x WD Ultrastar DC HC550 18TB, 512MB, 7200 RPM, SAS 12Gb/s, 512E SE

Мережеве обладнання

Сервісна мережа: Ubiquiti UniFi USW-Pro-48 48x1GbE RJ45 + 4 x 10GbE SFP+
Обчислювальна мережа: Ubiquiti Switch ECS- AGGREGATION-EU, 48 x SFP28 (10/25GbE) + 6 x QSFP28 (100GbE).



Рис. 4.40.1: Принципова структура розрахункового кластеру ІФКС.

Україні. Новий кластер є складовою частиною Міждисциплінарного центру комп'ютерного моделювання (МЦКМ) ІФКС, який буде використовуватись як центр колективного користування. Зокрема, укладено договори про використання МЦКМ в освітньому процесі та наукових дослідженнях студентами, аспірантами та науковими працівниками Львівського національного університету ім. Івана Франка та Національного університету «Львівська Політехніка», а також працівниками академічних інститутів. З вересня 2025 р. МЦКМ розпочав проводити тематичні наукові семінари за всіма напрямками комп'ютерного моделювання та розвитку штучного інтелекту.

При МЦКМ створено сучасний комп'ютерний клас на 10+1 місце, який з 2025 року повноцінно функціонує і був задіяний в процесі навчання студентів НУ «Львівська Політехніка» та аспірантів методам комп'ютерного моделювання. Функціонування МЦКМ та його комп'ютерного класу дає змогу якісно підняти рівень освіти випускників університетів різних факультетів і спеціальностей в галузі комп'ютерного моделювання. Крім того, такого роду активність сприяє тіснішому співробітництву, в тому числі міждисциплінарному, між академічними інститутами та вищими навчальними закладами.

На 2026 рік заплановано збільшення потужностей кластера ще на 750 CPU ядер та 40 тисяч GPU ядер.

5 Анотації вибраних результатів наукових досліджень

5.1 Статистична фізика

Представлено розгорнуте формулювання єдиного підходу до опису багаточастинкових систем, що поєднує методи статистичної фізики та квантової теорії поля. Переваги такого підходу полягають в описі фазових переходів під час утворення нових просторово неоднорідних фаз, а також в описі квазірівноважних систем із просторово неоднорідним розподілом частинок (наприклад, самогравітаційних систем) і метастабільних станів. Ідея використання підходу квантової теорії поля та пов'язані з нею теми (інтегрування за траєкторією, методи сідлової точки та стаціонарної фази, перетворення Габбарда-Стратоновича, теорія середнього поля та функціональні інтеграли) детально описано, щоб полегшити подальше розуміння та дослідити більше конкретних випадків [B.I. Lev and A.G. Zagorodny. Applications of Field Theory Methods in Statistical Physics of Nonequilibrium Systems. World Scientific Publication., Singapore, 2021, 341 p. doi: 10.1142/12091] (*акад. НАН України Б.І. Лев, акад. НАН України А.Г. Загородній, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Представлено новий підхід, заснований на застосуванні нерівноважного статистичного оператора, який дає змогу врахувати неоднорідний розподіл частинок і температури. Такий метод використовує процедуру сідлової точки для знаходження основних внесків у статистичну суму і надає можливості отримати всі термодинамічні параметри систем. Передбачено можливі особливості поведінки взаємодійних систем, таких як гравітаційні системи, системи з кулонівським відштовхуванням тощо для різних термодинамічних умов. Сучасний нерівноважний статистичний опис розглядає лише ймовірні структури в самогравітаційній системі, але не описує метастабільних станів і нічого не говорить про часові шкали кінетичної теорії. Запропоновано новий підхід, що використовує нерівноважний статистичний оператор з урахуванням неоднорідних розподілів частинок і температури. Для знаходження домінуючого внеску у функцію розподілу використано метод сідлової точки, що дає можливість отримати всі термодинамічні параметри системи, а відтак пролити світло на проблему самогравітації з неоднорідними розподілами частинок і темпе-

ратури. Визначено рівняння стану для самогравітівної системи. Знайдено нову довжину статистичної нестабільності та параметри просторово-неоднорідного розподілу частинок і температури для реальних гравітівних систем. Запропоновано підхід, який уможлиблює кількісно прогнозувати розподіл частинок у самогравітівній системі. Вперше наведено опис формування просторово неоднорідних розподілів частинок, що супроводжуються змінами температури [B.I. Lev, A.G. Zagorodny, *Statistical Description of Non-equilibrium Many-body Systems*, *Ukrainian Journal of Physics* 65(12), 1056-1079 (2020). doi: 10.15407/ujpe65.12.1056] (акад. НАН України Б.І. Лев, акад. НАН України А.Г. Загородній, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).

Для системи з неоднорідним розподілом макроскопічних параметрів отримано термодинамічне співвідношення, залежне від просторової точки (координати). У запропонованому підході для отримання такого співвідношення використано базові ідеї методу нерівноважного статистичного оператора в поєднанні з перетворенням Габбарда-Стратоновича. Перш за все, визначено термодинамічне співвідношення для системи з однорідним розподілом частинок. Передбачаються можливі особливості поведінки систем із різним характером взаємодії в нерівноважному випадку. Методом сідлової точки знаходяться домінуючі внески в функцію розподілу і всі термодинамічні параметри систем із різним характером взаємодії. Утворення сідлового стану в системах взаємодіючих частинок при різних температурах і розподілах частинок має однакову фізичну природу і тому може бути описане однаковим чином. Розглянено системи з притягальними і відштовхувальними взаємодіями, а також самогравітаційні системи [A.P. Rebesh, B.I. Lev, A.G. Zagorodny, *Thermodynamic relation for the systems with inhomogeneous distribution of particles*, *Condens. Matter Phys.*, 2025, Vol. 28, No. 3, 33502: 1–17 doi: 10.5488/CMP.28.3, Preprint doi: 10.48550/arXiv.2509.12797] (акад. НАН України Б.І. Лев, акад. НАН України А.Г. Загородній, А.П. Ребеш, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).

Досліджено особливості фазової поведінки та термодинамічних властивостей коміркової моделі плинку із взаємодією Кюрі–Вейса. Модель описує відкриту систему N частинок, що взаємодіють, у тривимірному об'ємі V , умовно поділеному на N_v однакових кубічних комірок об'ємом v . Парний потенціал взаємодії Кюрі–Вейса між частинками складає глобальне середньо польове притягання між будь-якою парою частинок у системі, а також локальне відштовхування між частинками, які знаходяться в одній комірці. Здійснено точний розрахунок цієї моделі в термодинамічній гра-

ниці, отримано явне рівняння стану. Показано, що ця модель має нескінчену послідовність фазових переходів першого роду за достатньо низьких температур. Проаналізовано механізм цих переходів, зокрема на основі поведінки хімічного потенціалу як функції густини. Отримано і досліджено ізотерми, фазові діаграми та криві співіснування системи, а також визначено координати критичної точки та поведінку параметра порядку в перших трьох фазових переходах каскаду [M.P. Kozlovskii, O.A. Dobush, Phase behavior of a cell model with Curie–Weiss interaction, *J. Mol. Liq.* 2022. Vol. 353. P. 118843:1-8. doi: 10.1016/j.molliq.2022.118843] (*М.П. Козловський, О.А. Добуш, ІФКС ім. І.П. Юхновського НАН України*).

Із врахуванням негаусових флуктуацій параметра порядку та потенціалу взаємодії Морзе розраховано параметри критичної точки для рідких лужних металів (натрію і калію). Досліджено поведінку ізотермічної стисливості, флуктуацій густини та теплового розширення для натрію в надкритичній температурній області. Суттєве зростання ізотермічної стисливості та флуктуацій густини біля критичної точки вказує на значну чутливість густини до незначних флуктуацій тиску. Коефіцієнт теплового розширення для різних фіксованих значень тиску проявляє типове для газів зменшення із зростанням надкритичної температури. Зображено лінію Відома, яка розділяє газоподібну та рідиноподібну структури плинину при температурах вище критичної. Проведені розрахунки справедливі у вузькому околі критичної точки, який є проблематичним для теоретичних та експериментальних досліджень [I.V. Pylyuk, M.P. Kozlovskii, O.A. Dobush, M.V. Dufanets, Morse fluids in the immediate vicinity of the critical point: Calculation of thermodynamic coefficients, *J. Mol. Liq.* 2023. Vol. 355. P. 122322:1-5. doi: 10.1016/j.molliq.2023.122322] (*І.В. Пилюк, М.П. Козловський, О.А. Добуш, ІФКС ім. І.П. Юхновського НАН України*).

Досліджено термодинамічну поведінку коміркової моделі плинину з модифікованим потенціалом взаємодії Морзе в області надкритичних температур та високих тисків. Встановлено, що стисливість і теплове розширення коміркової моделі плинину розбіжні в критичній точці і відображають максимуми в надкритичній області. Відтак, отримано лінії Відома моделі та розширено фазову діаграму високо за межі критичної точки в область високих тисків. Запропоновано ще один спосіб для отримання межі між рідино- та газоподібними областями вище критичної точки, який базується на умові рівності нулевій ефективного хімічного потенціалу $M = 0$ (ефективний хімічний потенціал – величина прямо пропорційна до фізичного хімічного потенціалу, функція температури). У рамках нашого під-

ходу умова $M = 0$ виконується вздовж лінії фазового співіснування станів газ-рідина включно до критичної точки. Реалізація умови $M = 0$ вище критичної точки виглядає природним продовженням лінії співіснування в надкритичну область. Встановлено, що вище критичної температури лінії максимумів функцій відгуку та лінія, отримана на основі умови $M = 0$ добре узгоджуються [Dobush O. A., Kozlovskii M. P., Romanik R. V. Supercritical crossover lines in the cell fluid model. *Ukrainian Journal of Physics*. 2025. Vol. 70, no. 1. P. 35–41; doi: 10.15407/ujpe70.1.35] (М.П. Козловський, О.А. Добуш, Р.В. Романік, ІФКС ім. І.П. Юхновського НАН України).

Досліджено рівноважні властивості адсорбату, утвореного в ході реакції $A+B \rightarrow \emptyset$ на двовимірній підкладці з каталітичними елементами, розподіленими неоднорідно, що моделюється деревовидними ґратками Бете або Хусімі з випадково розподіленими каталітичними зв'язками з концентрацією p . Для симетричного випадку з рівними хімічними потенціалами частинок обох сортів ($\mu_A = \mu_B = \mu$) та однаковою взаємодією частинок одного й того ж сорту ($J_A = J_B = J$) точно розраховано фазову діаграму. Показано існування декількох фаз в залежності від J , μ і p [D. Shapoval, M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin, “Binary lattice-gases of particles with soft exclusion: Exact phase diagrams for tree-like lattices”, *J. Phys. A*. Vol. 54 85003 (2021)] (М. Дудка, Д. Шаповал, ІФКС ім. І.П. Юхновського НАН України; G. Oshanin, O. Bénichou, CNRS, Франція).

У рамках тристанової ґраткової моделі, що враховує взаємодії між найближчими сусідами та наступними за ними, проведено аналіз поведінки іонної рідини в ультратонкій порі, що містить тільки один шар іонів. За допомогою комп'ютерного моделювання та аналітичних розрахунків виявлено, що взаємодії між сусідами наступними за найближчі збільшують ємність та густину накопиченої енергії у порі і можуть значно впливати на фазову поведінку. Зокрема, в деякому діапазоні прикладеної напруги отримано великомасштабні мезофази, які можуть відігравати важливу роль у накопиченні енергії [Ya. Groda, M. Dudka, A.A. Kornyshev, G. Oshanin, S. Kondrat, Ionic liquids in conducting nanoslits: How important is the range of the screened electrostatic interactions? *Journal of Physics: Condensed Matter* Vol. 34 26LT01 (2022)] (М. Дудка, ІФКС ім. І.П. Юхновського НАН України; A.A. Kornyshev, Imperial College, Велика Британія; G. Oshanin, CNRS, Франція; S. Kondrat, PAN, Польща).

Проведено порівняльний аналіз мікроскопічних підходів до опису багаточастинкових класичних систем, які дозволяють строго перейти від формалізму індивідуальних координат частинок до колективних змін-

них із наступним використанням функціональних методів. Встановлено взаємозв'язок методу колективних змінних, який розвивався в роботах І.Р. Юхновського, з іншими техніками, зокрема з методами, що базуються на перетворенні Габбарда–Стратоновича чи ідеях теорії функціоналу густини. На прикладі кількох моделей статистичної фізики, зокрема для моделей магнітних рідин та розплавів солей, продемонстровано переваги методу колективних змінних при отриманні мікроскопічно обґрунтованих виразів для функціоналу густини (*акад. НАН України І.М.Мриглюд, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України*).

Резонансне тунелювання взаємодійних ферміонів та підбар'єрне захоплення в асиметричних потенціалах. Теоретично досліджено ефекти різних ймовірностей тунелювання взаємодійних ферміонів залежно від орієнтації асиметричного бар'єру, на відміну від квантових частинок, що не взаємодіють між собою. Визначено режими, де взаємодії опосередковують тунелювання через підбар'єрне резонансне захоплення та посилюють тунелювання через багаточастинкове резонансне тунелювання – явище, що виникає виключно внаслідок міжчастинкових взаємодій та принципово відрізняється від традиційного одночастинкового резонансного тунелювання [E. Bilokon, V. Bilokon, D.R. Lindberg, A. Sotnikov, L. Kaplan, and D.I. Bondar, Few-fermion resonant tunneling and underbarrier trapping in asymmetric potentials, *Commun. Phys.* 8, 259 (2025)] (*чл.-кор. НАН України А.Г. Сотніков, Е. Білоконь, В. Білоконь, ННЦ ХФТІ НАН України*).

Підхід одношарових тензорних мереж для тривимірних квантових систем. Запропонований метод включає використання шарової структури як для спрощення пошуку проєктованих станів заплутаних пар у термодинамічній границі, так і для одношарового відображення кінцевого скорочення групи перенормування кутової матриці переносу. Результати отримано для моделі Гайзенберга на кубічній ґратці і знайдено гарну узгодженість з попередніми результатами з Монте Карло моделювання [I.V. Lukin and A.G. Sotnikov, Single-layer tensor network approach for three-dimensional quantum systems, *Phys. Rev. B* 110, 064422 (2024)] (*І.В. Лукін, чл.-кор. НАН України А.Г. Сотніков, ННЦ ХФТІ НАН України*).

Спектральні щілини дво- та тривимірних багаточастинкових квантових систем у термодинамічній границі. Представлено вираз для спектральної щілини, що відкриває нові можливості для виконання та прискорення спектральних розрахунків квантових багаточастинкових систем. Розроблений підхід вимагає лише незначних модифікацій широко використовуваного простого методу оновлення та є обчислювально лег-

ким порівняно з іншими підходами. Метод перевірено на прикладі обчислень спектральних щілин у відповідних моделях Ізінга з поперечним полем та знайдено відповідність із раніше опублікованими результатами теорії збурень [I.V. Lukin, A.G. Sotnikov, J.M. Leamer, A.B. Magann, D.I. Bondar, Spectral gaps of two- and three-dimensional many-body quantum systems in the thermodynamic limit, Phys. Rev. Research 6, 023128 (2024)] (І.В. Лукін, чл.-кор. НАН України А.Г. Сотніков, ННЦ ХФТІ НАН України).

Багаточастинкові кореляції в одновимірних оптичних ґратках із лужноземельними та подібними їм атомами. Досліджено багату природу кореляцій в основному стані ультрахолодних атомів, захоплених в оптичних ґратках, що залежать від стану. Зокрема, розглянуто взаємодійні ферміонні атоми ітербію або стронцію, що реалізують двоорбітальну модель Габбарда з двома спіновими компонентами. Проведено аналіз моделі в одновимірному режимі з експериментально релевантною ієрархією тунелювання та амплітуд взаємодії за допомогою підходів точної діагоналізації та матричного добутку станів, а також вивчено кореляційні функції в секторах густини, спіну та орбіталі як функції змінних густин атомів в основному та метастабільному збудженому станах [V. Bilokon, E. Bilokon, M.C. Banuls, A. Cichy, and A. Sotnikov, Many-body correlations in one-dimensional optical lattices with alkaline-earth(-like) atoms, Sci. Rep. 13, 9857 (2023)] (чл.-кор. НАН України А.Г. Сотніков, Е. Білоконь, В. Білоконь, ННЦ ХФТІ НАН України).

Досліджено вплив випадково спрямованої осі анізотропії на критичну поведінку аморфного магнетика. Проведено комп'ютерне моделювання двох різних розподілів осі випадкової анізотропії. Передбачено можливість виникнення фази спінового скла для ізотропного розподілу [J.J. Ruiz-Lorenzo, M. Dudka, Yu. Holovatch. Phys. Rev. E 106 (2022) 034123] (акад. НАН України Ю.В. Головач, М.Л. Дудка, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

За допомогою методу теоретико-польової ренормалізаційної групи проведено оцінки ділянки стійкості, у якій універсальна критична поведінка d -вимірної n -векторної моделі із далекосяжною взаємодією змінюється під впливом структурного безладу. Наші результати свідчать про те, що Ізінгівські ($n = 1$) магнетики при $d = 2$ і $d = 3$ можуть належати до нового класу універсальності [D. Shapoval, M. Dudka, Yu. Holovatch. Low Temp. Phys. 48 (2022) 1187–1193; М. Дудка, Д. Шаповал, Ю. Головач. Журн. Фіз. Досл. 28 (2024) 2601, 12 с.] (акад. НАН України Ю.В. Головач, М.Л. Дудка, Д.Ю. Шаповал, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

5. Анотації вибраних результатів наукових досліджень

Показано, що зміни в універсальній критичній поведінці структурно-непорядкованих магнетиків можна спостерігати не тільки для розведених магнетиків з немагнітними домішками але вони можуть також реалізуватися при наявності двох (і більше) хімічно різних магнітних компонент [M. Dudka, M. Krasnytska, J. J. Ruiz-Lorenzo, Yu. Holovatch. JMMM 575 (2023) 170718; J. Ruiz-Lorenzo, M. Dudka, M. Krasnytska, Yu. Holovatch. Phys. Rev. E 111 (2025) 024127] (акад. НАН України Ю.В. Головач, М.Л. Дудка, М.Б. Красницька, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Для бінарної суміші з конкуруючими взаємодіями поблизу плоскої стінки отримано функціонал великого термодинамічного потенціалу локальної концентрації та локальної густини. Отримані на його основі рівняння Ейлера–Лагранжа для концентрації та густин розв’язано аналітично з використанням теорії збурень. Отримано експоненціально загасаючі осциляції концентрації з такими ж характерними довжинами, як у кореляційній функції концентрація-концентрація, які добре узгоджуються з моделюванням. Для надлишкової густини знайдено монотонне загасання, що накладається на експоненціально загасаючі осциляції, період яких дорівнює половині періоду осциляцій концентрації, що також узгоджується з моделюванням. Моделювання показує локальне впорядкування в шарах, паралельних стінці, які багаті одним із двох компонентів [O. Patsahan, A. Meyra, A. Ciach, Effect of a confining surface on a mixture with spontaneous inhomogeneities, J. Mol. Liq. 363, 119844 (2022)] (О.В. Пацаган, ІФКС імені І.Р. Юхновського НАН України, А. Цях, Інститут фізичної хімії ПАН, Польща, А. Мейра, Інститут фізики рідин і біологічних систем, Аргентина).

5.2 Фізика рідкого стану

Водні розчини поліетиленгліколю досліджено методом малокутового розсіювання нейтронів у широкому діапазоні молекулярних мас та концентрацій полімерів. Дані розсіювання моделювалися за допомогою форм-фактора гаусового ланцюга в поєднанні з наближенням випадкової фази, що забезпечило хорошу апроксимацію у всьому досліджуваному діапазоні концентрацій. Показано, що поліетиленгліколь у діапазоні молекулярних мас 0,4–20 кДа у воді за фізіологічної температури $T = 37^\circ\text{C}$ поводить себе як випадковий клубок в умовах майже тета-розчинника. Отримані результати важливі як орієнтир при описі складних сумішей з поліетиленгліколем, що використовуються в різних застосуваннях

[Almasy L., Artykulnyi O.P., Petrenko V.I., Ivankov O.I., Bulavin L.A., Yan M., Haramus V.M. Structure and Intermolecular Interactions in Aqueous Solutions of Polyethylene Glycol, *Molecules* 27(8), 2573 (2022)] (*акад. НАН України Л.А. Булавін, КНУ ім. Тараса Шевченка*).

Зсувну в'язкість водних розчинів колагену експериментально досліджено в діапазоні температур 303–353 К та при концентраціях колагену 1–7 мас.%. Структурний фазовий перехід спостерігався при ~315 К, що відповідає початку формування протофібрил. Нижче цієї температури утворюються протофібрили, що містять як впорядковані, так і неупорядковані сегменти, причому частка впорядкованих сегментів збільшується зі зниженням температури, досягаючи ~30% при 303 К. Аналіз температурної залежності параметра порядку для структурного переходу в системі вода-колаген свідчить про те, що цей перехід має характеристики фазового переходу другого роду [Bulavin L.A., Cherevko K.V., Khorolskyi O.V., Svechnikova O.S., Zabashta Y.F. Mechanism of protofibril formation in aqueous collagen solutions, *AIP Advances* 14 (11), 115116: 1–7 (2024)] (*акад. НАН України Л.А. Булавін, КНУ ім. Тараса Шевченка*).

Запропоновано структурну модель гідрогелю, яка концептуалізує його як комбінацію двох компонентів: твердого та м'якого. Твердим компонентом системи виступає набрякла полімерна мережа зі зв'язаною водою. Твердий компонент утворює основу, пори якої містять м'яку складову: вільну воду. Розвинуто для цієї моделі метод, який дозволяє визначити пористості гідрогелю на основі желатину або агарози. Пористість як відносний об'єм системи, зайнятий вільною водою. Метод базується на теорії орієнтаційних дефектів, згідно з якою об'єм вільної води у твердому стані пропорційний концентрації орієнтаційних дефектів. Числове значення такої концентрації також корелює з інтенсивністю діелектричної релаксації в системі. Пористість гідрогелю можна визначити як відношення інтенсивності релаксації гідрогелю до інтенсивності релаксації води. Інтенсивність релаксації – це висота піку уявної складової комплексної діелектричної проникності. Отже, пористість гідрогелю можна оцінити експериментально з діелектричної спектроскопії. У такий спосіб встановлено, що пористість желатинового гідрогелю становить 0,48 та 0,35 для масової концентрації полімеру 12% та 35% відповідно; пористість агарози становить 0,83 та 0,69 для масової концентрації полімеру 1,5% та 2%, відповідно [Lazarenko M.M., Zabashta Y.F., Honcharuk D.K., Alekseev O.M., Yablonska K.S., Vergun L.Y., Andrusenko D.A., Lazarenko M.V., Bulavin L.A. Determining hydrogel porosity through dielectric relaxation intensity ratios

between water and hydrogel, *Soft Matter* 21(21):4298–4305 (2025)] (акад. НАН України Л.А. Булавін, КНУ ім. Тараса Шевченка).

Проведено критичний аналіз низки нещодавно опублікованих результатів, що стосуються спроб розвитку «інтуїтивної» теорії рідин на основі ідей Френкеля. Показано, що отримані в такий спосіб вирази, зокрема для повздовжньої спектральної функції та дисперсії колективних збуджень, не відтворюють відомі результати у граничних випадках гідродинамічного режиму та суцільного середовища, а отже не є коректними. Доведено, що не відповідає дійсності також твердження про взаємозв'язок між питомою теплоємністю і шириною щілини у спектрах поперечних колективних збуджень [Bryk T., Jakse N., Mryglod I., Ruocco G., Wax J.-F. Comment on “Universal effect of excitation dispersion on the heat capacity and gapped states in fluids”, *Phys. Rev. Lett.* 126 (22) 229601: 1–2 (2021)] (чл.-кор. НАН України Т.М. Брик, акад. НАН України І.М. Мриглод, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Для систем з іонним типом провідності отримано точні співвідношення для залежних від частоти парціальних провідностей у випадках «система заряджених частинок» та «система заряджених частинок у розчиннику», проведено порівняльний аналіз отриманих співвідношень із даними, що відомі в науковій літературі. Показано, що вивчення частотних залежностей парціальних провідностей відкриває нові перспективи у дослідженнях колективних збуджень оптичного типу в розплавах солей, а також в інших плинах з іонним типом провідності (акад. НАН України І.М. Мриглод, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

З використанням підходу узагальнених колективних мод проаналізовано вклад перехресних динамічних кореляцій між модами різної тензорної вимірності, які не проявляються у гідродинамічній границі, на дисперсійні залежності спектрів узагальнених гідродинамічних колективних мод густих плинів при виході з гідродинамічного режиму. Розраховано відповідні поправки (акад. НАН України І.М. Мриглод, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Запропоновано теоретичну схему аналізу колективної динаміки бінарних розплавів із першопринципного комп'ютерного моделювання, яка полягає у використанні термо-в'язкопружної моделі бінарних рідин із кореляторами, які визначаються тепловими флуктуаціями як підгоночними параметрами. Для підгонки використовуються три часові парціальні функції густина-густина та три парціальні часові кореляційні функції парціальних потоків. Запропонована схема розрахунку дисперсії колективних

збуджень успішно застосована до аналізу результатів ab initio моделювання динаміки розплаву Al_2O_3 (чл.-кор. НАН України Т.М. Брик, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Досліджено спектри колективних збуджень у трикомпонентній скловидній системі ZrCuAl . Метою дослідження було встановити можливість спостереження поперечних акустичних збуджень в експериментах з розсіювання рентгенівських променів, про що повідомлялось американською експериментальною групою в 2020 році. Показано, що в трикомпонентному склі існують дві повздовжні та дві поперечні вітки збуджень оптичного типу, які мають практично однакові дисперсії з різною поляризацією. Встановлено дисперсійні залежності акустичних та оптичних збуджень, залежність від хвильового числа їх згасання та внески в спостережувальні динамічні структурні фактори (чл.-кор. НАН України Т.М. Брик, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Встановлено існування квазі-зв'язаних атомів (які утворюють короткочасові хімічні зв'язки та перебувають найближчими сусідами протягом щонайменше 30 пікосекунд) у розплавах Sb . Показано, що такі квазі-зв'язані атоми коливаються з протилежними фазами та встановлено їх вплив на колективну динаміку та дисперсію колективних збуджень. З першопринципного комп'ютерного моделювання розраховано та проаналізовано відповідні часові кореляційні функції та динамічні структурні фактори для розплаву Sb при температурі та густині експериментів з розсіювання рентгенівських променів. Встановлено характерні частоти квазі-зв'язаних атомів та їх внески в часові кореляції густина-густина і потік-потік у розплавах Sb (чл.-кор. НАН України Т.М. Брик, І.-М. Іленков, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Для пояснення великого періоду осцилюючого загасання тиску роз'єднання, що спостерігався в експериментах для водного розчину солі Li-TFSI [T.S. Groves et. al., J. Phys. Chem. Lett. 12, 1702 (2021)], розвинуто теорію для концентрованих електролітів із мезоскопічними негомогенностями. Для моделі, що складається зі сферичних іонів різного розміру і неявного розчинника, який індукує сильне притягання між однойменними іонами, розраховано кореляційні функції. Отримані результати вказують на те, що мезоскопічні неоднорідності можуть виникнути, коли сума кулонівської та індукованої водою взаємодії між однойменними іонами є притягальною на коротких і відштовхувальною на великих відстанях. Отриманий період і область загасання кореляцій напівкількісно узгоджуються з експериментом [O. Patsahan, A. Ciach, Mesoscopic inhomogeneities

in concentrated electrolytes, ACS Omega, 7, 6655–6664 (2022)] (О.В. Пацаган, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, А. Цях, Інститут фізичної хімії ПАН, Польща).

Нещодавно в комп'ютерному моделюванні молекул води всередині вуглецевої нанотрубки [X. Ma et al., Phys. Rev. Lett., 118 (2017) 027402] було висунуто припущення про існування температурно-індукованого псевдо-фазового переходу в околі температури $T = 150$ К, яке пояснювалося зміною у взаємній орієнтації дипольних моментів молекул води. Проведене моделювання такої системи з використанням методів квантової хімії та молекулярної динаміки дозволило побудувати спрощену ґраткову модель, яка відтворює поведінку псевдо-одновимірного ланцюжка молекул води в обмеженому об'ємі нанотрубки. Спрощена одномірна ґраткова модель ланцюжка описує попарно взаємодіючі диполі, де кожен із них може перебувати в одному з трьох станів (диполь утворює водневий зв'язок (ВЗ), не утворює ВЗ і спрямований вздовж осі нанотрубки, не утворює ВЗ і орієнтований перпендикулярно до осі нанотрубки). Така ґраткова модель враховує не лише вклади від коротко- і далекосяжних взаємодій частинок, а й обертальні ступені вільності в залежності від участі молекул води у ВЗ. Аналіз ґраткової моделі встановив, що зміна температури змінює баланс між різними вкладками і спричинює модуляцію орієнтації молекул, приводячи до втрати їх впорядкування при температурах вище 150 К. Підхід, запропонований для молекул води, застосовано для опису ланцюжка молекул аміаку всередині вуглецевої нанотрубки. Оскільки молекули аміаку є полярними і здатні утворювати ВЗ між собою, в таких системах повинні виникати явища впорядкування, подібні до випадку молекул води (М.Ю. Дручок, В.О. Краснов, Т.Є. Крохмальський, О.В. Держко, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

5.3 Рідкі кристали

Здійснено огляд важливих результатів П.М. Томчука, отриманих в одній з багатьох галузей теоретичної фізики, де були запропоновані нові рішення та підходи, а саме, в теорії колоїдів рідинних кристалів. Запропоновано теоретичний підхід до опису далекосяжної пружної взаємодії між частинками, зануреними в рідинний кристал. Показано, що характер взаємодії між частинками визначається порушенням симетрії розподілу пружного поля директора навколо кожної частинки. Порушення симетрії спричинене деформаціями поля директора поверхнею частинки, введеної в рі-

динний кристал. У випадках, коли частинки викликають деформацію з ненульовим обертальним моментом, передбачається кулоноподібна взаємодія між ними. Крім того визначено, що кулонівська взаємодія відбувається у випадках взаємодії частинки з областю деформації, що характеризується певним розподілом пружного поля. Представлено експериментальні дані, що підтверджують теоретичні передбачення кулонівської взаємодії макроскопічних частинок, занурених у рідинний кристал [B.Lev, Coulomb-like elastic interaction in liquid crystal colloids, *Ukr. J. Phys.*, 70, №10, 692 (2025). doi: 10.15407/ujpe70.10.684] (акад. НАН України Б.І. Лев, ІТФ ім. М.М. Боголобова НАН України).

Визначено фізичні властивості нових фторованих ароматичних поліетерів із різним вмістом азобензольних фрагментів в основному полімерному ланцюзі для встановлення зв'язку між кількістю груп і макроскопічним відгуком полімерного матеріалу. Виконано хімічний синтез, визначено молекулярну структуру, зроблено комплексний аналіз властивостей полімерів, зокрема їх механічної міцності та термічної поведінки. Більший вміст азобензольних фрагментів знижує механічну міцність полімерних матеріалів. Полімери з більшим вмістом азобензолу при опроміненні поляризованим світлом ($\lambda = 532$ нм) демонструють вищі значення індукованого подвійного променезаломлення. Отже, досліджувані полімери є перспективними для створення різного роду оптичних елементів із використанням рідиннокристалічних комірок, які складаються з доменів високої роздільної здатності з різними напрямками орієнтації директора [I.M. Tkachenko, Yu.I. Kurioz, R.M. Kravchuk, O.V. Shekera, A.V. Glushchenko, V.G. Nazarenko, V.V. Shevchenko, Azobenzene–N-salicylideneaniline based aromatic polymers as efficient light-responsive materials. *Polymer* 279 (2023) 125991. doi: 10.1016/j.polymer.2023.125991; Tkachenko I.M., Kurioz Yu.I., Kravchuk R.M., Tolstov A.L., Glushchenko A.V., Nazarenko V.G. and Shevchenko V.V. Development of a light-responsive fluorinated poly(arylene ether) copolymer containing azobenzene groups in the main polymer chain. *Molecular Systems Design & Engineering*, 2024, 9(2), 149. doi: 10.1039/D3ME00150D; I.M. Tkachenko, Yu.I. Kurioz, R.M. Kravchuk, Ya.L. Kobzar, D.V. Litoshenko, A.V. Glushchenko, V.V. Shevchenko, V.G. Nazarenko. Photoinduced birefringence and liquid crystal orientation on polymers with different azobenzene content in the main chain. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2024, 16, 39, 52945. doi: 10.1021/acsami.4c11876; I. Tkachenko, T. Samoilenko, M. Gumenna, D. Kalabis, R. Kravchuk, V. Nazarenko, I. Matolínová, V. Shevchenko, Synthesis of Poly(p-Terphenyl N,N-Dimethylpiperidinium)s Using Asymmetric Ketone-

Based Branching Agent, *Macromolecular Materials and Engineering*, 2025; 310, issue 12:e00225 doi: 10.1002/mame.202500225] (Ю. Курйоз, Р. Кравчук, Т. Толочко, Д. Літошенко, чл.-кор. НАН України В. Назаренко, Інститут фізики НАН України, Інститут фізичної хімії ПАН; І. Ткаченко, О. Шакера, Я. Кобзар, О. Толстов, В. Шевченко, ІХВС НАН України).

У порівнянні зі своїми твердими аналогами, фероелектричні нематичні рідинні кристали (ФНРК) демонструють багату різноманітність поляризаційних доменних структур не обмежених кристалографічними осями. Було визначено, що тонкі плівки ФНРК створюють доменні стінки (ДС) конічної форми, наприклад параболи. Такі конічні структури зменшують зв'язаний заряд у межах як самих доменів, так і на ДС. Адекватний опис таких доменних структур вимагає аналізу електростатичної енергії, що є надзвичайно складним завданням. Замість цього продемонстровано, що добре наближення до експериментально спостережуваних полідоменних текстур отримується, коли розбіжність спонтанної поляризації, яка спричиняє зв'язаний заряд, сильно корегується, припускаючи, що пружна константа поперечного згину $K_{11}(\text{splay})$, в енергії Осена-Франка набагато більша, ніж $K_{22}(\text{twist})$ та $K_{33}(\text{bend})$. Модель використовує той факт, що вектор поляризації по суті паралельний директору НРК по всьому зразку [P. Kumari, O. Kurochkin, V. Nazarenko, O. Lavrentovich, D. Golovaty, P. Sternberg, Conic sections in ferroelectric nematics: Experiments and mathematical modeling, *Physical Review Research* 6 (4), 043207 (2024), doi: PhysRevResearch.6.043207] (О.В. Курочкін, чл.-кор. НАН України В.Г. Назаренко, Інститут фізики НАН України, Інститут фізичної хімії ПАН, П. Кумарі, Д. Головатий, П. Стенберг, О. Лаврентович (Кентський державний університет, США).

Досліджено в'язко-пружні властивості ліотропних хромонічних рідких кристалів та динаміку активних колоїдних частинок. Активні колоїди, в даному випадку бактерії, що плавають у цьому в'язкопружному середовищі, викликають деформації директора, які можуть сильно впливати на їх швидкість, температурну поведінку та рухливість у всьому діапазоні нематичної фази. Щоб знайти спотворення директора, джгутик представлений, як сукупність пружних монополів, а швидкість бактерії визначається з балансу енергії, витраченої на рух, а також в'язкого опору та нематодинамічного розсіювання [Yu. Faidiuk, L. Skivka, P. Zelena, O. Tereshchenko, O. Buluy, V.M. Pergamenschchik, and V. Nazarenko, Anchoring-induced nonmonotonic velocity versus temperature dependence of motile bacteria in a lyotropic nematic liquid crystal. *Phys. Rev. E* 104, 054603

(2021). doi: 10.1103/PhysRevE.104.054603] (Ю. Файдюк, П. Зелена, Л. Сквірка, КНУ ім. Т. Шевченка; О. Булуй, О. Терещенко, В. Пергаменицик, чл.-кор. НАН України В. Назаренко, Інститут фізики НАН України).

Правило однієї четвертої $|s| = N/4$, яке зазвичай використовується для визначення топологічної сили s дефектів у нематичних зразках, де N є число віток згасання в текстурах оптичної поляризації навколо ядра дефекту, справедливе лише у простих випадках рівномірного розподілу директора по товщині комірки. Для комірки з лінійною та циркулярною орієнтацією директора на підкладках воно порушується через закручування директора. Топологічний заряд оптичного вихору, що генерується такою коміркою, може перемикатися за допомогою прикладеної напруги з $|l| = 1$ на $|l| = 2$, яка знімає закрутку директора в комірці. Перетворення є оборотним при зменшенні напруги. Це важливий випадок перемикання оптичного заряду одним і тим самим зразком, який базується на електрично керованій зміні оптичної активності у зразку [О. Krupych, T. Dudok, I. Skab, Y. Nastishin, Z. Hrabchak, A. Chernenko, O. Buluy, P. Zelenov, V. Nazarenko, O. Kurochkin, R. Vlokh, Electric field controlled switching of an optical vortex charge with a liquid crystal cell, *Optics Communications*, 2025, www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S003040182500121X] (О. Крунич, Т. Дудок, І. Скаб, Р. Влох, ЛНУ ім. І. Франка; О. Булуй, О. Курочкін, П. Зеленов, чл.-кор. НАН України В. Назаренко, Інститут фізики НАН України та Інститут фізичної хімії ПАН; Ю. Настішин, Національна військова академія ім. П. Сагайдачного).

Досліджено спонтанну ізомеризацію донорно-акцепторних сполук Стенхауса, закріплених на поверхні золота, та візуалізовано їх за допомогою скануючої тунельної спектроскопії. Дослідження виявило палітру молекулярних структур, включно з такими, що мають фероелектричне впорядкування. Процес самоорганізації супроводжується поступовим збільшенням популяції закритої форми сполук, що сприяє кулонівській стабілізації, що призводить до появи характерної дипольної архітектури на поверхні металу. Отриманий моношар можна розглядати як новий клас полярних поверхонь, що мають значні перспективи для застосування в оптоелектронних технологіях [A.I. Senenko, A.A. Marchenko, O. Kurochkin, O.L. Kapitanchuk, M.Kravets, V.G. Nazarenko and V.Sashuk, Spontaneous switching and fine structure of donor–acceptor Stenhouse adducts on Au(111). *Nanoscale*, 2025, 17, 214. doi: 10.1039/d4nr03942d] (чл.-кор. НАН України О. Марченко, А. Сененко, О. Курочкін, чл.-кор. НАН України В. Назаренко, Інститут фізики НАН України, Інститут фізичної хімії ПАН; М. Кравець,

В. Сашук, Інститут фізичної хімії ПАН, О. Капітанчук, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).

5.4 Макромолекулярні та біологічні системи

На основі моделі респіраторного механізму деструкції ціаніду мікроорганізмами представлено вплив клітинної стінки на процес деструкції в умовах з початковою короткочасною обробкою імпульсним електричним полем та без неї. Встановлено, що початкова короткочасна обробка імпульсним електричним полем збільшує проникливість ціаніду через клітинну стінку, а також швидкість активації дихальних ланцюгів [V.S. Yakovliev, V.N. Ermakov, B.I. Lev. Impact of the Cell Wall on Cyanide Biodegradation in a Model of Respiratory Mechanism. *Ukrainian Journal of Physics*, 68(2), 113 (2023). doi: 10.15407/ujpe68.2.113. Q3] (*акад. НАН України Б.І. Лев, В.С. Яковлев, В.Н. Єрмаков, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Запропоновано підхід до аналізу процесу дифузії різних ціанідних сполук через пори і зовнішні мембрани грам-негативних бактерій. Продемонстровано вплив таких сполук на пори та ефективні коефіцієнти дифузії та коефіцієнти проникнення ціанідних сполук при різному співвідношенні радіусів, заряду іона ціаніду, потенціалу Доннана, власного потенціалу пори, кількості та довжини загальних пор, частки відкритих каналів та розміру бактерій. Вперше пропонується процедура порівняння швидкості дифузії ціаніду через зовнішню мембрану зі швидкістю біодеградації ціаніду, що дозволяє встановити умови, за яких біодеградація є процесом, обмеженим дифузією – дифузія є значно швидшим процесом, ніж біодеградація. Дану процедуру було застосовано до кількох експериментальних досліджень та прогнозування діапазону позаклітинних концентрацій ціаніду, для яких дифузія є значно швидшим процесом, ніж біодеградація. Продемонстровано вплив отриманих результатів на теоретичні погляди про кінетику біодеградації ціаніду [V. Yakovliev and B. Lev, Impact of bacterial outer membrane and general porins on cyanide diffusion and biodegradation kinetics, *Journal of Hazardous Material*, 480, (2024), 136117, doi: 10.1016/j.jhazmat.2024.136117, Q1,IP] (*акад. НАН України Б.І. Лев, В.С. Яковлев, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*)

Побудовано нелінійну теорію транспорту зарядів у системах «Донор – Молекулярний ланцюжок – Акцептор» та «Донор – Альфа-спіральна білкова молекула – Акцептор», яка пояснює механізм транспорту електронного заряду на макроскопічні відстані у приладах сучасних нано-

технологій та технологій на основі біомімікрії з використанням новітніх низьковимірних функціональних матеріалів цього класу. Такий механізм при відповідних значеннях параметрів системи забезпечується тунелюванням електронів із донора до найближчого кінця квантового дроту, в ролі яких виступає молекулярний ланцюжок або органічний чи неорганічний полімер, з подальшим формуванням електросолітона завдяки електрон-фононній взаємодії у ланцюжку, яка сприяє утворенню потенціальної ями для електрона. У такому автолокалізованому солітонному стані електрон разом із деформацією рухається з мінімальною дисипацією енергії до протилежного кінця молекулярного дроту, звідки тунелює на молекулу акцептора. Показано, що параметри солітона та ефективність електронного транспорту залежать від значень параметрів системи. Знайдено оптимальні значення цих параметрів для найбільш ефективного транспорту та показано, що ця ефективність може сягати 80–90 відсотків навіть для дуже довгих ланцюжків (50–70 вузлів) [L.S. Brizhik. Fifty years of the Davydov's soliton. *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2024. (3): 102—106. doi: 10.15407/visn2024.03.102] (*Л.С. Брижик, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Вперше в рамках теорії Дірака отримано точні аналітичні вирази для тривимірних зв'язаних електронних станів у кулонівському полі ланцюжка додатньо заряджених йонів. Знайдено новий спінорний інваріант для цієї задачі. Показано, що в такому підході природним чином виникає зв'язування між спіном електрона та його одновимірним рухом вздовж ланцюжка без будь-якої необхідності штучним способом вводити у відповідні рівняння руху додаткову так звану спин-орбітальну взаємодію [A. Eremko, L. Brizhik, V. Loktev. Bound electron states in a charged chain within the Dirac description. *Low Temp. Phys.* 51, 680–687 (2025) doi: 10.1063/10.0036744] (*Л.С. Брижик, акад. НАН України В.М. Локтев, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Встановлено особливості руху електросолітонів, що є особливим видом заряджених полярионів великого радіусу в низьковимірних молекулярних системах, у зовнішньому змінному в часі магнітному полі. Показано, що в періодичному в часі магнітному полі динаміка електросолітонів істотно залежить від орієнтації поля. Розраховано хвильові функції солітона у двох випадках, коли поле паралельне та перпендикулярне молекулярним ланцюжкам. У першому випадку динаміка солітона є суперпозицією динаміки гармонічного осцилятора у зовнішньому періодичному магнітному полі у площині, перпендикулярній до ланцюжків,

та руху вільного солітона вздовж ланцюжка. У перпендикулярному магнітному полі динаміка солітона є суперпозицією плоских хвиль у площині, перпендикулярній до ланцюжків, та поздовжнього руху солітона з параметрами, що залежать як від амплітуди, так і частоти зовнішнього поля. Розраховано швидкість солітона і показано, що вона є змінною у часі та містить гармоніки з частотою поля та кратними частотами. Це зумовлює випромінювання солітоном звукових та електромагнітних хвиль. Такі динамічні властивості солітона впливають на процеси транспорту зарядів у електропровідних низьковимірних сполуках та в окислювально-відновлювальних процесах в біологічних системах. На основі результатів вивчення впливу магнітних полів на динаміку Давидовських солітонів у білкових макромолекулах розвинуто теорію нетеплового резонансного впливу змінних у часі магнітних полів на біологічні системи, що пояснює механізм їх терапевтичної дії, що широко застосовується в медицині [L. Brizhik. Dynamics of the Davydov's soliton in external oscillating magnetic field. *Chaos, Solitons and Fractals* 187 (2024) 115459, doi: 10.1016/j.chaos.2024.115459; L. Brizhik. Known and less known about the Wave of Translation, Davydov's soliton and its dynamics in an oscillating magnetic field. *Low Temp. Phys.* (2025) 51, 655–664, doi: 10.1063/10.0036611] (*Л.С. Брижик, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Показано, що вплив електричних та магнітних полів на солітонний механізм транспорту енергії та зарядів у біологічних системах може мати фізіологічні наслідки, що підтверджується незалежними даними медичних досліджень із застосуванням терапевтичних методів із використанням йонних циклотронних частот [Liguori, A., Brizhik, L., Liguori, S., Silli, L., Bangrazi, S., Petti, F., Pinti, M., Pistelli M.I., Giuliani, L. Effects of Ion Cyclotron Frequencies on Human Resistance and Reactance in 31 Healthy Subjects. *Radiation*. 2022, 2, 357–375. doi: 10.3390/radiation2040027] (*Л.С. Брижик, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Встановлено можливість утворення солітон-подібних станів у квазідвовимірних сильно анізотропних молекулярних системах. Такі матеріали описуються системою зв'язаних рівнянь, які включають нелінійне рівняння Шредінгера та рівняння Кадомцева–Петвіашвілі II роду. Знайдено розв'язки цих систем рівнянь та показано існування нелінійних локалізованих мод у вигляді стійких зв'язаних електрон-фононних станів для широкого інтервалу значень параметрів системи. Ці результати пояснюють ефективний електронний транспорт в ангармонічних квазідвовимірних сильно анізотропних системах, що використовуються у сучасних наноте-

хнологіях [L.A. Cisneros-Ake, L. Brizhik, Ju.T. Becerra-Sagredo, M.G. Velarde. Nonlinear charge and energy transport in anharmonic quasi-two-dimensional systems. *Phys.Rev. E*, 109, 024207 (2024). doi: 10.1103/PhysRevE.109.024207] (*Л.С. Брижик, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Методи нерівноважної статистичної механіки використані для отримання грубозернистих кінетичних рівнянь, що дозволяють описати поведінку в часі повільних процесів, що відбуваються на тлі більш швидких. У молекулярних системах як найбільш швидкі процеси виступають коливальна релаксація і стохастичні відхилення положення електронних енергетичних рівнів системи від їх стаціонарних положень. З урахуванням даної обставини як приклад описано кінетику одно- і двоелектронного переносу по білкових ланцюжках, опосередковану киснем передачею триплетного збудження в пігментно-білковому комплексі, кінетику температурно-незалежної десентізаціяції больових рецепторів, а також конформаційну регуляцію ферментативних реакцій [L.N. Christophorov, V.I. Teslenko, E.G. Petrov, Features of kinetic and regulatory processes in biosystems, *Low Temp. Phys.* 47, 273-291 (2021)] (*чл.-кор. НАН України Е.Г. Петров, Л.М. Христофоров, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Із врахуванням факту, що переходи між станами молекулярного з'єднання відбуваються на фоні набагато швидших релаксаційних процесів у молекулярних термах та зонах провідності електродів, отримано кінетичні рівняння для інтегральних заселеностей молекулярних термів, а також вирази для залежності від часу електронного струму та потужності випромінювання молекули-флуорофору. Продемонстровано часовий процес реорганізації трансмісійних каналів у залежності від величини та полярності напруги затвору та зовнішнього освітлення. Отримано залежність загальних швидкостей від частинних швидкостей, що характеризують перезарядку молекули, а також випромінюючі та невипромінюючі переходи в молекулі. Оцінки показують, що в транзисторі на основі ZnPc характеристичний час переходу складає 10–100 пс за умови, що струм залишається в діапазоні 0.1–10 нА [E.G. Petrov, Ye.V. Shevchenko, V.V. Gorbach, S. Lyubchik, A. Lyubchik. Features of gate-tunable and photon-field-controlled optoelectronic stationary and transient processes in a molecular junction: Application to a ZnPc-based transistor. *AIP Advances* 12, 105020 (16 pp), 2022. doi: 10.1063/5.0119257] (*чл.-кор. НАН України Е.Г. Петров, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Одним із напрямків мініатюризації елементної бази оптоелектроніки є використання окремих молекул-флуорофорів як генератора фото-

нів при проходженні струму через нанорозмірний пристрій «електрод1-флуорофор-електрод2» (1ф2-система). При такому процесі відбувається перезарядка молекули, в результаті якої частина енергії електронів, що проходять через молекулу, використовується для збудження молекули. Збуджена молекула випромінює квант світла, стаючи таким чином джерелом електролюмінесценції. При цьому ефективність світлового випромінювання визначається тим, при якій прикладеній різниці потенціалів відбувається резонансний перенос електрона через флуорофор. Показано, що як і в напівпровідникових транзисторах регуляція електролюмінесценції можлива за допомогою додаткового електрода, що виконує роль бази. Відмінність полягає в тому, що стани молекули мають електронно-коливний спектр із добре вираженими частотами переходів і тому резонансна трансмісія електронів через 1ф2-систему може проходити з додатковим поглинанням або випусканням кванта коливання. Знайдено умови появи електролюмінесценції залежно від положення найнижчих за енергією електронних станів ароматичної молекули – флуорофору (типу фталоціаніну і порфірину), а також прикладеної до електродів різниці потенціалів і додаткового потенціалу бази (*чл.-кор. НАН України Е.Г. Петров, ITФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Запропоновано модель формування потоку магнонів через феромагнітний ланцюг, що з'єднує феромагнітні контакти. Модель дає змогу оцінити ефективність переносу магнонів на великі відстані за умов, коли ланцюг діє як міст, що опосередковує тунельні та стрибкові шляхи транспорту магнонів [Petrov, E.G. Long-range magnon transfer across a bridging ferromagnetic chain via sequential and tunnel route, *J. Appl. Phys.*, 2024, 135, No. 13, 134301 (1–9). doi: 10.1063/5.0197658] (*чл.-кор. НАН України Е.Г. Петров, ITФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Виявлено визначальну роль кінетики переходів у фотоактивних молекулярних діодах у формуванні оптоелектронних процесів, зумовлених тунелюванням електронів між наконечником тунельного мікроскопа та флуорофором, а також між флуорофором і металевим наноелектродом. Показано, як ця кінетика контролює як струм через флуорофор, так і електролюмінесценцію флуорофора, включаючи електрофлуорохромію [Petrov, E.; Kapitanchuk, O.; Shevchenko, Ye.; Gorbach, V.; Lyubchik, A. Features of optoelectronic processes in a molecular junction based on a fluorophore with optically active frontier π -orbitals: electrofluorochromism in a ZnPc-based junction // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2024, 26, No. 34, 22761–22774. doi: 10.1039/D4CP01328J; Petrov, E.G.; Shevchenko, Ye.V.; Leonov, V.Q.;

Teslenko, V.I. Kinetics in the two-level system with strong time-dependent coupling of its states to the phonon bath: spin-boson description // *Ukr. J. Phys.*, 2024, **69**, No. 8, 552–561, doi: 10.15407/ujpe69.8.552] (чл.-кор. НАН України Е.Г. Петров, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).

Запропоновано механізм квантової комунікації між наномагнітами, вбудованими в мікрохвильові резонатори. Механізм базується на формуванні суперобмінного зв'язку між локалізованими магнонами, що утворюються в резонаторах внаслідок взаємодії електромагнітної моди резонатора з магнітостатичною модою спінового збудження в наномагнетіку. Суперобмінний зв'язок проявляється в тунелюванні магнітостатичного магнона через феромагнітний ланцюжок, що з'єднує наномагнетики (чл.-кор. НАН України Е.Г. Петров, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).

Виведено кінетичне рівняння для опису тимчасової еволюції популяцій станів дворівневої системи (TLS), яка має нестационарний зв'язок з однією з мод коливань, тоді як зв'язок з іншими модами коливань термостату проявляється у стандартній незалежній від часу формі. Триетапне визначення ймовірності квазістационарної зайнятості, спричиненої зв'язком станів TLS з фоновим термостатом за умов, коли один зі зв'язків має періодичну залежність від часу. Дві швидкі стадії пов'язані зі стационарним та нестационарним зв'язками станів TLS з коливаннями навколишнього середовища, а повільна стадія з масштабом близько 1 нс безпосередньо відображає процес стрибкових переходів між станами TLS (чл.-кор. НАН України Е.Г. Петров, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).

Використовуючи модель двох прикордонних орбіталей та кінетичний підхід, показано, що основні особливості електролюмінесценції флуорофору в поєднанні «СТМ – флуорофор – металевий контакт» можуть бути пояснені Штарківським зсувом та кінетикою електронного переносу у зазначеному з'єднанні. Додатково знайдено енергії молекулярних орбіталей, а також енергії нейтральної та зарядженої молекули, залучених до оптоелектронного процесу. Це показує шлях до управління оптоелектронним процесом за допомогою різниці електричних потенціалів між голкою та металевим контактом (чл.-кор. НАН України Е.Г. Петров, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України).

Запропоновано нове пояснення причин руху бактерій у водному середовищі. Математична модель базується на гідродинаміці активної речовини та враховує динаміку поляризації середовища та окремих бактерій. Дія світла та активний рух діелектричних областей з різними показниками заломлення всередині бактерії призводять до утворення нерівномір-

5. Анотації вибраних результатів наукових досліджень

ного розподілу дипольних моментів на її межі з водним середовищем. Такий розподіл буде рухатися вздовж бактерії і обертатися, що в кінцевому підсумку призведе до напруги на навколишній рідині і, в свою чергу, до руху бактерій. Слід зазначити, що запропонований механізм відрізняється від добре відомого за допомогою джгутіка тим, що він базується на внутрішньому процесі однієї бактерії. Крім того, колективний рух бактерій може викликати збурення самої води. Якщо концентрація заряджених частинок у середовищі збільшується, рух поляризованих областей створює більшу деформацію поверхні бактерії і викликає перерозподіл поляризації. Вищезазначені фактори мають найбільший вплив на рух бактерій [B. Lev and O. Chernyak, Polarization Mechanism of Bacteria Motion in Aquatic Media. Preprint doi: 10.48550/arXiv.2508.15037] (*акад. НАН України Б.І. Лев, О. Черняк, ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України*).

Показано, що біоорганічна молекула зі складною структурою в комплексі з графеном зазнає значної деформації. Особливо це стосується заряджених молекул, таких як катіонний порфірин ТМРyP4, який використовується у фотодинамічній терапії ракових пухлин. Встановлено, що сильна катіон- π взаємодія, яка відбувається між π -системою графенової поверхні та позитивно зарядженими бічними групами ТМРyP4, значно посилює адсорбцію молекули та супроводжується більш значною структурною деформацією, ніж у нейтральних порфіринів. Спостережене явище слід враховувати при використанні графенових наноматеріалів як наноплатформ для доставки лікарських препаратів у клітину (*чл.-кор. НАН України В.О. Карачевцев, С.Г. Степаньян, М.В. Карачевцев, В.О. Валєєв, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України*).

Показано утворення нанобіокомплексів молекул протималярійних препаратів артемізинінового ряду з молекулами аскорбінової кислоти та з молекулами мембранних фосfolіпідів. Отримано структурні та енергетичні характеристики комплексу. Запропоновано молекулярний механізм модуляції біологічної дії артемізинінових препаратів вітаміном С при їх одночасному застосуванні у медичній практиці (*В.А. Пашинська, С.Г. Степаньян, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України*).

Встановлено, що адсорбція двониткової РНК на оксид графену в основному відбувається через графенові sp^2 -домени. Показано, що взаємодія двониткового олігонуклеотиду з графеном починається зі взаємодії кінцевої пари азотистих основ з π -системою графену та залежить від його довжини. Моделювання методом молекулярної динаміки показали, що взаємодія біополімерного дуплексу з графеном залежить від його довжи-

ни: короткий дуплекс завжди набуває перпендикулярної орієнтації відносно графену з наступним розпакуванням, тоді як довгий дуплекс може зберігати дволанцюгову структуру в паралельній орієнтації, хоча і з частковим порушенням структури (*чл.-кор. НАН України В.О. Карачевцев, М.В. Карачевцев, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України*).

Моделювання методом молекулярної динаміки показали, що заряджена поверхня графену суттєво впливає на взаємодію з олігонуклеотидом, його конформацію та величину енергії адсорбції. Встановлено, що конформації олігонуклеотиду, адсорбованого на нейтральній та позитивно заряджених поверхнях, мають подібність, але повна енергія взаємодії біополімеру із зарядженою поверхнею значно більша, оскільки помітний внесок дає кулонівське притягання. Виявлено, що для негативно зарядженої поверхні графену електростатичне відштовхування з негативно фосфатними основами олігонуклеотиду суттєво послаблює загальну енергію зв'язку (*М.В. Карачевцев, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України*).

Виявлено, що оксид графену (ГО) індукуює утворення дуплексних структур (А-мотив) із двох одониткових гомополінуклеотидів (поліаденінова кислота) у водній суспензії при рН7, тоді як без ГО А-мотив з'являється тільки у кислому середовищі. А-мотив, адсорбований на ГО, має нижчу температуру плавлення, ніж цей дуплекс, створений при рН < 5 без участі оксиду графену (45 °С проти 65 °С), що свідчить про його структурну недосконалість. Нанобіогібриди А-мотиву із ГО можуть бути використані при розробці нових стимул-чутливих нанобіоструктур, наномашин (*чл.-кор. НАН України В.О. Карачевцев, В.О. Валєєв, М.В. Карачевцев, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України*).

Завдяки аналізу експериментальних раманівських спектрів індивідуальних одностінних вуглецевих нанотрубок в оточенні ДНК виявлено, що при їх допуванні редокс-активною сполукою (дитіотреїтолом) спостерігається селективне збільшення інтенсивності смуг радіально дихальної моди, пов'язаної з металевими нанотрубками. Цей зріст інтенсивності з'являється завдяки допуванню цих нанотрубок дірками. Виявлені зміни у спектрах металевих нанотрубок при допуванні їх дитіотреїтолом спостерігаються завдяки зростанню електрон-фононної взаємодії і відновленню аномалії Кона (*М.В. Курносів, чл.-кор. НАН України В.О. Карачевцев, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України*).

Вперше досліджено температурну стабільність наногібридів (розміром ~90 нм), створених природною ДНК із наночастинками TiO₂, та показано, що вони не руйнуються при нагріванні від 20 до 90 °С. Виявлено,

5. Анотації вибраних результатів наукових досліджень

що при збільшенні кислотності (від рН 7 до рН 5) зменшується взаємне відштовхування між наногібридами і при нагріванні формуються їх агрегати з розміром ~ 220 нм. Ця агрегація з'являється завдяки появі в адсорбованій ДНК одониткових ділянок, які об'єднують сусідні наногібриди. Отримані результати мають важливе фундаментальне значення, зокрема, встановлення механізму взаємодії наночастинок оксидів металів з ДНК, а в практичній площині вони можуть бути використані при розробці новітніх методів ефективної доставки лікарських препаратів у клітини та комплексної терапії (О.Ю. Гламазда, Є.Л. Усенко, А.Ю. Свідерська, чл.-кор. НАН України В.О. Карачевцев, ФТНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України).

Вперше спостережено люмінесценцію квантових точок MoS_2 у присутності нуклеотидів ДНК або РНК, отриманих методом рідиннофазної ексfolіації мікрочисталів MoS_2 за допомогою ультразвуку у водних суспензіях. На основі спектрального аналізу квантових точок MoS_2 встановлено, що структурні особливості нуклеотидів впливають на люмінесцентні властивості квантових точок MoS_2 . Встановлено, що пуринові нуклеотиди dAMP і dGMP є більш ефективними для отримання люмінесцентних квантових точок MoS_2 , ніж піримідинові нуклеотиди. Основна причина спостереження більш інтенсивної люмінесценції квантових точок MoS_2 у присутності dAMP пов'язана з відсутністю кисню в структурі аденіну на відміну від інших досліджуваних нуклеотидів, який може викликати гасіння люмінесценції. Квантові точки MoS_2 можуть бути використані у комбінованій терапії ракових тканин як наноплатформи для доставки антиракових ліків у клітини, для лікування методом фототермальної терапії, люмінесцентні властивості можуть бути використані для візуалізації ракових пухлин (чл.-кор. НАН України В.О. Карачевцев, М.В. Курносів, ФТНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України).

Запропоновано механізм взаємодії нуклеотиду (dAMP) з квантовими точками MoS_2 через координаційний зв'язок з атомами Мо, розташованими на краях поверхні MoS_2 або в місцях дефектів, де є контакт з атомом Мо. Ковалентні зв'язки сприяють адсорбції dAMP на квантові точки MoS_2 . Структурна гнучкість нуклеотиду, адсорбованого на квантовій точці MoS_2 , дозволяє поєднання нековалентної стекінгової взаємодії нуклеотидної основи та координаційного зв'язку фосфатної групи з атомами Мо, розташованими на краях. Це призводить до утворення найбільш енергетично стабільного комплексу. Отримано енергії взаємодії, ІЧ та раманівські спектральні характеристики комплексів (С.Г. Степаньян, чл.-кор. НАН України В.О. Карачевцев, ФТНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України).

Запропоновано нову методику швидкого встановлення наявності широкого спектру іонів металів у воді, яка базується на техніці низькотемпературного мас-спектрометричного експерименту при використанні фізичного явища фазового розшарування водних розчинів при їх заморожуванні. Суттєвими перевагами розробленої методики перед існуючими є висока точність та значна економія часу та ресурсів: вимірюються мікролітри води за короткий інтервал часу (не більше десятка хвилин) (*М.В. Косевич, В.С. Шелковський, О.А. Боряк, ФТНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України*).

Розроблено новий підхід до виготовлення біосумісних 2-D нановолоконних матів методом електроспіннінгу із вбудованими антимікробними агентами на основі суміші полімерів PVP та РММА. В отриманому нановолоконному маті РММА забезпечує механічну міцність та забезпечує поступове вивільнення антибактеріальних агентів в оточуюче середовище, а PVP сприяє контрольованому вивільненню антимікробних агентів. Отримано нановолоконні мати з інкорпорованими антимікробними агентами: фенілаланіном, наночастинками срібла (AgNPs), метиленовим блакитним, антибіотиком левофлоксацином та досліджено час їх вивільнення у водному середовищі. Експерименти показали, що після розчинення PVP матеріал нановолокна набуває пористої структури, яка забезпечує доступ молекул води до AgNPs. Завдяки цьому AgNPs, що зафіксовані у волокнах пористого РММА, можуть вивільняти йони срібла протягом тривалого часу. Отримано часові залежності вивільнення левофлоксацином з нановолокон, з яких випливає, що приблизно 70% препарату вивільняється протягом 2–3 годин. Досліджені нановолоконні мати з інкорпорованими антимікробними агентами демонструють перспективність їх застосування в різних біомедичних галузях, включаючи тканинну інженерію або виготовлення ефективних ранових перев'язувальних матеріалів з антимікробним ефектом (*чл.-кор. НАН України В.О. Карачевцев, О.М. Плохотніченко, ФТНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України*).

Встановлено, що катіонний феофорбід (Pheo-a), який використовується як фотосенсибілізатор у фотодинамічній терапії раку, зв'язується з полі-L-лізином у нейтральних водних буферах із низькою та близькою до фізіологічної іонної сили. Використовуючи абсорбційну та поляризовану флуоресцентну спектроскопію, флюорометричне титрування та флуоресцентне плавлення показано, що взаємодія є високо кооперативною та призводить до ~40-кратного гасіння флуоресценції Pheo-a разом зі збільшенням поляризації флуоресценції, що вказує на утворення π - π -укладених агрегатів барвника на зовнішній стороні поліпептиду. Таким

5. Анотації вибраних результатів наукових досліджень

чином з'ясовано, що феофорбід, введений у клітину, активно зв'язується з протилежно зарядженими білками. Схильність молекул Pheo-a до самоасоціації при їх взаємодії з білками може знижувати фотодинамічну активність цього барвника, оскільки димери або агрегати цього порфірину демонструють знижене утворення синглетного кисню (О.О. Рязанова, ФТНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України).

Оновлено базу даних Protein–Nucleic Acid Structural Database with Information on Accessible Surface Area (ProtNA-ASA). ProtNA-ASA є загальнодоступною в Інтернеті за новою адресою www.ire.kharkov.ua/ProtNA-ASA. База даних містить інформацію про структуру ДНК, площі доступної поверхні атомів та доповнена значеннями електростатичного потенціалу малого жолобка фрагментів вільної ДНК і ДНК у складі комплексів з білками. Використання інформації з бази даних ProtNA-ASA дає можливість дослідити біофізичні характеристики подвійної спіралі, що впливають на впізнавання білками певних послідовностей ДНК як «своїх» сайтів зв'язування. Така інформація необхідна для кращого розуміння механізмів утворення високоспецифічних білково-нуклеїнових комплексів, зокрема непрямого механізму впізнавання [Zhytnikova, M.Y., Shestopalova, A. VProtNA-ASA database: new version including information about electrostatic potential of DNA minor groove. *Biophysical Bulletin*, (2022). (48), 18–24, doi: 10.26565/2075-3810-2022-48-02] (М.Ю. Житнікова, Г.В. Шестопалова, ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України).

Методом мікрохвильової діелектрометрії на частотах γ -дисперсії діелектричної проникності вільної води проведено візуалізацію клітинного сигналу від суспензії еритроцитів пацієнтів із серцевою недостатністю та електромагнітного сигналу від плазми крові хворих на алергодерматози, асоційовані з COVID-19. Показано, що діелектрична проникність може бути запропонована як критерій для діагностики серцевої недостатності та як додатковий засіб експрес-візуалізації вірусної інвазії. Методом молекулярного докінгу показано можливість утворення стабільних комплексів транспортного білка плазми крові – сироваткового альбуміну людини (САЛ) – з детермінантами пеніциліну G, а також встановлено ймовірні сайти зв'язування детермінантів пеніциліну G з молекулами САЛ. Виявлення специфічних сайтів зв'язування є важливим для розробки та синтезу нових імуногенних антигенів, які зможуть стимулювати імунну систему та сприяти виробленню специфічних антитіл для запобігання алергічній реакції [Khmil N.V., Kolesnikov V.G. Molecular docking of human serum albumin with penicillin G. *Biophysical Bulletin*, (2023), (49), 7–

19, doi: 10.26565/2075-3810-2023-49-01] (В.Г. Колесніков, Н.В. Хміль, ІРЕ ім. О.Я. Ускова НАН України).

Досліджено взаємозв'язок між структурно-агрегаційним станом бичачого сироваткового альбуміну (БСА) та питомою довжиною і кількістю сегментів зигзагоподібних текстур, що формуються на плівках під час висушування розчинів БСА з іонами Al^{3+} і Fe^{3+} . Показано, що іони Al^{3+} і Fe^{3+} змінюють рН середовища, зменшують ступінь гідратації БСА та впливають на параметри текстур плівок. Додавання Al^{3+} призводить до компенсації поверхневого потенціалу білка, а зміни УФ- і флуоресцентних спектрів зумовлені переважно взаємодією іонів з молекулою білка та її конформаційними перебудовами. Зі зростанням концентрації Fe^{3+} зниження рН внаслідок гідроксилування іонів сприяє екрануванню поверхневого потенціалу БСА та можливій агрегації білкових частинок. Отримані результати свідчать про те, що аналіз текстур полімерних плівок може слугувати спрощеною модельною системою для вивчення взаємодії білків з іонами металів *in vivo* та оцінки дії $AlCl_3$ і $FeCl_3$ як коагулянтів у водоочисненні та медицині [Glibitskiy, D., Gorobchenko, O., Nikolov, O. et al. Influence of aluminum and iron chlorides on the parameters of zigzag patterns on films dried from BSA solutions. *Sci. Rep.* (2023). 13, 942645, doi: 10.1038/s41598-023-36515-4; Gorobchenko O.A., Glibitskiy D.M., Nikolov O.T., et. al. The effect of biologically active substances on BSA and on the textures of films obtained by drying water-salt solutions of BSA. (2024). *Low Temp. Phys.* 50, N 1, 51–58, doi: 10.1063/10.0023892] (Г.М. Глибицький, Д.М. Глибицький, М.О. Семенов, ІРЕ ім. О.Я. Ускова НАН України; О.О. Горобченко, О.Т. Ніколов, Т. Челпеш, І. Зайцева, Т. Джимієва, О. Рошаль, ХНУ ім. В.Н. Каразіна).

Наразі реєструються нові випадки COVID-19, спричинені вірусом SARS-CoV-2, що зумовлює актуальність пошуку ефективної противірусної терапії, зокрема на молекулярному рівні, де мішенями дії є ключові молекулярні комплекси, необхідні для реплікації вірусу. З метою оцінки спорідненості потенційних противірусних препаратів методом молекулярного докінгу досліджено енергетичні та топологічні характеристики зв'язування системних глюкокортикоїдів з головною протеазою SARS-CoV-2, спайк-(S)-білком і комплексом S-білок – ангіотензинперетворювальний фермент 2 (рецептор клітини-хазяїна). На основі отриманих результатів визначено структури комплексів молекулярних мішеней з лігандами, встановлено високу спорідненість їх зв'язування та окреслено можливі механізми інгібуючої дії глюкокортикоїдів. Отримані дані поглиблюють розуміння молекулярних механізмів дії фармакологічних

препаратів і є важливим етапом у розробці нових та перепрофілювані відомих противірусних засобів [Khmil N., Shestopalova A., Kolesnikov V. Assessing the binding affinity of glucocorticoids to the SARS-CoV-2 spike protein – angiotensin-converting enzyme 2 complex: a molecular docking simulation study. *Biologichni Studii / Studia Biologica.* (2025) 19(3), 21–32. doi: 10.30970/sbi.1903.835; Khmil N.V., Kolesnikov V.G., Boiechko-Nemovcha A.O. Binding characteristics of systemic glucocorticoids to the SARS-CoV-2 spike glycoprotein: In silico evaluation. (2025). *Low Temp. Phys.* 51, 96–103, (*Fiz. Nyzk. Temp.* 51, 104–112, (2025) doi: 10.1063/10.0034652); Khmil N.V., Shestopalova A.V., Kolesnikov V.G. In silico analysis of binding sites for potential inhibitors targeting the complex of furin protease and the SARS-CoV-2 spike protein. *Biophysical Bulletin.* (2025). 54:7–24, doi: 10.26565/2075-3810-2025-54-01] (*В.Г. Колесніков, Н.В. Хміль, Г.В. Шестопалова, ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України; А.О. Боєчко-Немовча, ХНУ радіоелектроніки*).

Детально досліджено електронну природу 4-гідрокси-1Н-піроло[3,4-с]піридин-1,3,6(2Н,5Н)-тріону (НРРТ) у рідких середовищах за кімнатної температури за допомогою методів стаціонарної та часороздільної фемтосекундної транзйентної абсорбційної спектроскопії. Аналіз лінійних фотофізичних та фотохімічних параметрів НРРТ, включаючи спектри стаціонарного поглинання, флуоресценції та анізотропії збудження, а також час життя флуоресцентного випромінювання та квантових виходів фоторозкладу, виявив природу його великого стоксового зсуву, специфічні зміни постійних дипольних моментів при електронному збудженні, слабкі дипольні переходи з частково анізотропним характером та високу фотостабільність. Транзйентні спектри поглинання НРРТ були отримані з фемтосекундною роздільною здатністю, і не було виявлено характерних процесів релаксації сольватів у протонному (метанольному) розчиннику. Спостерігалось ефективне посилення світла в спектральному діапазоні флуоресценції НРРТ, але не було виявлено явищ суперлюмінесценції та лазерного випромінювання. Електронна структура НРРТ також була проаналізована за допомогою квантово-хімічних розрахунків з використанням методу DFT/B3LYP, показано хороше узгодження з експериментальними даними. Розробка та дослідження нових похідних піроло[3,4-с]піридину є важливими завдяки їхнім перспективним флуоресцентним властивостям та потенціалу для використання у фізіологічних застосуваннях [Bashmakova N.V., Shaydyuk Y.O., Dmytruk A.M., Świergosz T., Kachkovsky O.D., Belfield K.D., Bondar M.V., Kasprzyk W. *Nature of linear spectral properties and fast electronic relaxations in green fluorescent*

pyrrolo [3, 4-c] pyridine derivative. International Journal of Molecular Sciences, 22(11), 5592 (2021)] (акад. НАН України М.В. Бондар, ІФ НАН України).

Швидкі процеси релаксації у збуджених електронних станах функціоналізованих похідних аза-бор-дипірометену (аза-BODIPY) (1-4) досліджувалися у рідких середовищах за кімнатної температури, включаючи лінійні фотофізичні, фотохімічні та нелінійні оптичні (NLO) властивості. Виявлено оптичне посилення для нефлуоресцентних похідних 3 та 4 у ближньому інфрачервоному (NIR) спектральному діапазоні при фемтосекундному збудженні. Значення поперечних перерізів двофотонного поглинання (2PA) та поглинання у збудженому стані (ESA) були отримані для 1-4 у дихлорметані за допомогою фемтосекундного Z-сканування, обговорено роль бромних замісників у молекулярних структурах 2 та 4. Природа збуджених станів, що беруть участь в електронних переходах цих барвників, вивчалася за допомогою квантово-хімічних розрахунків TD-DFT, отримані спектральні параметри знаходяться у відповідності з експериментальними даними. Значні значення 2PA (максимальні поперечні перерізи ~ 2000 GM) та великі поперечні перерізи ESA $\sim 10^{-20}$ м² цих нових похідних аза-BODIPY 1-4 разом з їх виміряною високою фотостабільністю вказують на їхній потенціал для фотонних застосувань загалом та оптичних обмежень зокрема [Chang H.J., Bondar M.V., et al, Femtosecond Spectroscopy and Nonlinear Optical Properties of aza-BODIPY Derivatives in Solution. Chemistry, 28(17) e202104072 (2022)] (акад. НАН України М.В. Бондар, ІФ НАН України).

Механізм молекулярної фотолюмінесценції вуглецевих точок (ВТ) нещодавно привернув значну увагу завдяки кільком повідомленням про утворення малих флуорофорних частинок за умов реакції, що застосовуються в синтезі ВТ. У цій роботі виявлено два нові види, що випромінюють зелене світло, у постсинтетичних сумішах ВТ на основі лимонної кислоти (КА) та сечовини, які ідентифіковані як 3-(4-гідрокси-1,3,6-тріоксо-5Н-піроло[3,4-с]піридин-7-іл)-2,6-діоксо-піперидин-4-карбоксамід (НТ-РРС) та 7-[(2,5-діоксопіролідин-3-іл)метил]-4-гідрокси-5Н-піроло[3,4-с]піридин-1,3,6-тріон (DMHPPT). Менше досліджений ковалентний характер взаємодій між молекулярними флуорофорами та структурою ВТ проявляється на перших етапах формування ВТ та сечовини. Ідентифіковано специфічні реакційні центри у флуорофоре HPPT (4-гідрокси-1Н-піроло[3,4-с]піридин-1,3,6(2Н,5Н)-тріон), що бере участь в утворенні ковалентних зв'язків з ВТ; виявлено походження реакційних частинок у суміші для синтезу; а спектроскопічні наслідки цього зв'язування проде-

5. Анотації вибраних результатів наукових досліджень

монстровано за допомогою методів стаціонарної та часороздільної спектроскопії, що супроводжуються квантово-хімічним моделюванням. Гіпотеза, що передбачає утворення ВТ за рахунок молекулярних флуорофорів, підтверджена експериментально. Ковалентна природа зв'язування молекулярних флуорофорів з ВТ, що включає реакцію з функціональністю подвійного зв'язку ВТ, успішно поширена на флуорофори цитразинової кислоти, що свідчить про те, що подібний механізм може бути присутнім в інших системах вуглецевих точок [Kasprzyk W., Romańczyk P.P., Starzak K., Wysocka A., Waluda Ł., Świergosz T., Bondar M.V., Toward Better Understanding of Molecular Fluorophore Covalent Binding to Carbon Dots, Small Structures, 6(3) (2025)] (акад. НАН України М.В. Бондар, ІФ НАН України).

Отримано нові фундаментальні дані стосовно фізіології і біохімії тварин з програми наукових досліджень НААН «Адаптаційні процеси у високопродуктивних сільськогосподарських тварин за впливу екологічних та кліматичних чинників» («Фізіологія і біохімія тварин»). Основні результати стосуються впливу на тваринний організм підвищених температур довкілля, коротко- і довготривалого теплових стресів, впливу екологічних чинників на організм тварин, порушення їх метаболічних процесів та резистентності у контексті парадигми єдиного здоров'я. Інститутом біології тварин НААН за 2021–2025 рр. отримано 10 патентів України, 18 методичних рекомендацій; видано 11 монографій, посібників, довідників; розроблено три технічні умови України (чл.-кор. НААН України Ю.Т. Салига, Інститут біології тварин НААН України).

5.5 Комп'ютерне моделювання м'якої речовини

На основі DFT/DFT+*U* розрахунків одержані фундаментальні уявлення про взаємозв'язок між особливостями електронної структури і спектрами резонансного непружного рентгенівського розсіювання (RIXS) іридату з гіперстільніковою ґраткою β -Li₂IrO₃, що є кандидатом до матеріалів з властивостями квантової спінової рідини. На основі аналізу взаємовпливу спин-орбітальної взаємодії та електронних кореляцій зокрема показано, що різка перебудова спектрального піка RIXS при 0,7 еВ, яка спостерігається при структурному фазовому переході в цій сполуці при підвищенні зовнішнього тиску, пов'язана зі зникненням у фазі високого тиску сильних кулонівських кореляцій [*Physical Review B*. 2021. Vol. 103.

235127. 7 pp. doi: 10.1103/PhysRevB.103.235127. Q1] (чл.-кор. НАН України В.М. Антонов, ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України).

На основі DFT/DFT+ U розрахунків показано, що АФМ-сполука CeCo_2P_2 в об'ємі не демонструє жодних істотних властивостей, зумовлених $4f$ -станами, тоді як на поверхні порушення симетрії приводить до утворення некомпенсованого феромагнітного шару Co та до ефективного магнітного поля всередині поверхневого блока P-Co-P-Ce , що, у свою чергу, спричиняє часткове заповнення та спін-поляризацію $\text{Ce}4f$ -станів. Одержані результати демонструють, що матеріали, які не мають зумовлених електронними f -станами властивостей в об'ємі, можуть проявляти їх на поверхні [ACS Nano. 2022. Vol. 16. pp. 3573–3581. doi: 10.1021/acsnano.1c10705. Q1] (чл.-кор. НАН України В.М. Антонов, ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України).

На основі DFT/DFT+ U розрахунків показано, що кулонівські кореляції значно впливають на електронну структуру, а разом з нею на спектр RIXS $5d^5$ перовскітного оксиду Sr_2IrO_4 . Надано пояснення його експериментальних $\text{Ir } L_3$ та $\text{O } K$ спектрів RIXS в зонному підході. Показано, що відкриття забороненої зони в Sr_2IrO_4 зумовлене впливом як електронних кореляцій, так і магнітного впорядкування, а отже цей оксид має змішаний слетерівсько-моттівський характер. Виявлено, що найкраще узгодження розрахованих спектрів RIXS з експериментальними спостерігається для електронних кореляцій, яким відповідає ефективне локальне габбардівське відштовхування $U_{\text{eff}} = 1,2$ еВ. Встановлено, що в основному стані оксид Sr_2IrO_4 має неколінеарну магнітну структуру [Physical Review B. 2024. Vol. 109. 165120. 15 pp. doi: 10.1103/PhysRevB.109.165120. Q1] (чл.-кор. НАН України В.М. Антонов, ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України).

На основі DFT/DFT+ U розрахунків показано, що електронна структура іридату $\text{Ba}_3\text{InIr}_2\text{O}_9$ з Ir_2O_9 димерами визначається одночасним впливом кристалічного поля, спін-орбітальної взаємодії та електронних кореляцій. Пояснено його експериментальний $\text{Ir } L_3$ спектр RIXS в зонному підході. Найкраще узгодження розрахованого спектра RIXS з експериментальним спостерігається для електронних кореляцій, яким відповідає ефективне локальне габбардівське відштовхування $U_{\text{eff}} = 2,3$ еВ. Встановлено, що заборонена зона в $\text{Ba}_3\text{InIr}_2\text{O}_9$ з'являється під впливом електронних кореляцій та спін-орбітальної взаємодії, тому цю сполуку можна віднести до спін-орбітальних $5d$ ізоляторів Мотта [Physical Review Materials. 2025. Vol. 9. 104415. 16 pp. doi: 10.1103/mhbg-g51d. Q1] (чл.-кор. НАН України В.М. Антонов, ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України).

5. Анотації вибраних результатів наукових досліджень

Квантові точки (КТ) — це колоїдні нанокристали (НК) із визначними оптоелектронними властивостями. Залежно від бажаних властивостей НК можна створювати з використанням різних хімічних речовин, включаючи кремній, германій, селенід кадмію, арсенід галію та фосфід індію. Перовськіти галогенідів металів (МНР) виділяються серед цих альтернатив чудовою яскравістю світла та високим квантовим виходом. Поверхнево-активні ліганди мають важливе значення для контрольованого зародження і росту МНР НК, а також їх структурної цілісності та стабільності. В літературі описано велику різноманітність лігандів, однак їх вплив на НК залишається в основному невідомим. Розглянуто послідовність лігандів, які відрізняються хімічними деталями головної групи. Зв'язувальні властивості лігандів із різними головками були охарактеризовані в комп'ютерному моделюванні. На основі цих симуляцій було запропоновано ліганд із цвітеріонною головкою як найефективніший вид. Це припущення було перевірено та підтверджено в лабораторних експериментах [Kolomiets O., Stelmakh A., Rajan A., Sabisch S., Rainò G., Baumketner A., Kovalenko M.V., Bodnarchuk M.I. Designer Sulfonium-Based Capping Ligands for Lead Halide Perovskite Nanocrystals // ACS Nano. 2025. Vol. 19, no. 30, p. 27860–27872] (А.Б. Баумкетнер, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Моделювання методом Монте-Карло використано для дослідження решітки щільно упакованих жорстких еліпсів у конфігураціях так званих паралельних і діагональних станів, які є найбільш стабільними з термодинамічної точки зору. Вільні енергії цих двох станів обчислено для кількох розмірів системи з використанням методу кристала Ейнштейна. Точний розрахунок різниці вільної енергії між двома станами показав, що паралельна решітка є станом з найменшою вільною енергією. Походження ентропійної різниці між двома станами з'ясовано шляхом оцінки ролі поступального та обертового ступенів свободи [Wagner S., G. Kahl, R. Melnyk, A. Baumketner. On the lattice ground state of densely packed hard ellipses / Wagner S., G. Kahl, R. Melnyk, A. Baumketner // The Journal of Chemical Physics. 2024. Vol. 160, № 15. doi: 10.1063/5.0203311] (А.Б. Баумкетнер, Р.С. Мельник, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Розглянуто модельну систему з послідовністю KFFE, де центральні амінокислоти містять фенольні гідрофобні групи, які сприяють агрегації пептидів. Проведено симуляції для мономера у воді. В рамках моделі RAPID отримано 15 внутрі-пептидних потенціалів (4 бічні групи та дві на терміналах, які несуть заряд). Також отримано 15 попередніх міжмолеку-

лярних потенціалів із моделювання димерів у явному розчиннику. Результати представлено на конференції (А.Б. Баумкетнер, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Досліджено вплив виключеного об'єму поверхнево-активних лігандів на форму квантових точок (КТ), до яких вони приєднані. Розглянуто модель, в якій ліганди представлені твердими сферами, які зв'язані з поверхнею наночастинки (НК), що має форму призми. У моделюванні методом Монте-Карло виявлено, що ансамбль відповідних конформацій НК складається з невеликої кількості специфічних станів, які набувають форми нанопластин та наностержнів. Форму цих станів добре описують отримані теоретичні моделі. При збільшенні щільності лігандів вільна енергія різних станів приблизно однакова, що свідчить про те, що взаємодії виключеного об'єму між лігандами звужують конформаційний простір, доступний для НК, не створюючи статистичної переваги для будь-якої конкретної конфігурації [Baumketner A., Anokhin D., Patsahan Y. Excluded volume effect of surfactant ligands on the shape of nascent nanocrystal // Condensed Matter Physics. 2025. Vol. 28, no. 2, p. 23801] (А.Б. Баумкетнер, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

В бінарних рідинах формування спектрів колективних збуджень визначається існуванням двох гілок (акустичної та оптичної) збуджень фонного типу та взаємодією між ними. Існування так званого «швидкого звуку», який поширюється зі швидкістю в 2–3 рази вищою за макроскопічну адиабатичну швидкість, у бінарних рідинах із високою різницею мас компонент пов'язувалось із високочастотною гілкою. Загадкою було існування «швидкого звуку» в іонних розплавах із малою різницею мас компонент, зокрема в розплаві NaCl. З метою в'яснення природи «швидкого звуку» в іонних розплавах проведено ab initio симуляції великої системи (2400 частинок) для розплаву NaCl та інших бінарних рідин: іонних розплавів CuCl та LiBr, металічних рідин Pb₄₄Bi₅₆ та Li₄Tl, і звичайної ленард-джонсівської рідини KrAr. Аналіз результатів симуляцій на основі теорії узагальнених колективних мод показав, що в іонних розплавах типу NaCl далекодія відповідає за аномально велику позитивну дисперсію акустичної гілки, що відрізняється від загальноприйнятого механізму «швидкого звуку», який поширюється лише через легку компоненту бінарної рідини (чл.-кор. НАН України Т.М. Брик, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Встановлено особливості колективної динаміки для флюїду водню в області індукованого тиском переходу від молекулярного до атомарного флюїду (ПМАФ). На основі першопринципного комп'ютерного моде-

5. Анотації вибраних результатів наукових досліджень

лювання отримано залежність адиабатичної швидкості звуку від густини флюїду, яка містить плато в області переходу ПМАФ. Показано, що п'ятизмінна в'язкопружна динамічна модель дозволяє чудово відтворити часові кореляційні функції густина-густина і потік-потік лише для чистого молекулярного (найнижчий тиск) та чистого атомарного (найбільший тиск) флюїдів. В області ПМАФ було запропоновано розділення молекулярних та атомарних густин водневого флюїду для опису його динаміки як ефективної дво-компонентної суміші (*чл.-кор. НАН України Т.М. Брик, І.-М. Гленков, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України*).

6 Довідкові матеріали

6.1 Монографії

B.I. Lev and A.G. Zagorodny. Applications of Field Theory Methods in Statistical Physics of Nonequilibrium Systems. – World Scientific Publishing, Singapore, 2021. – 341 p., doi: 10.1142/12091

Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory (Ed. by Yu. Holovatch). Vol. 7. – World Scientific Publishing, Singapore, 2023. – 249 p., doi: 10.1142/9789811260438_fmatter

A.V. Chalyi. What is Medicine? Basic Principles of Physics in Medicine and Beyond. – Springer Cham, 2024. – 292 p., doi: 10.1007/978-3-031-64979-0

I.R. Yukhnovskii, M.F. Holovko. Theory of Classical Equilibrium Systems/ 2nd ed., English, revised and supplemented. – Kyiv: Akadempriodyka, 2025. – 444 p., doi: 10.15407/akadempriodyka.558.444

Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory (Ed. By Yu. Holovatch). Vol. 8. – World Scientific Publishing, Singapore, 2025. – 215 p., doi: 10.1142/9789819800827_fmatter

О.С. Пелетминський, Ю.В. Слюсаренко, А.Г. Сотніков. Теорія екзотичних станів у квантових фермі- та бозе-системах. – Київ: Наукова думка, 2023. – 480 с.

О.Л. Павленко, О.П. Дмитренко, М.П. Куліш, В.В. Лізунов, О.Д. Качковський. Фізичні властивості наносистем з π -спряженими міжмолекулярними зв'язками. – Київ: Наукова думка, 2024 – 213 с.

Ю.Т. Салига, Н.І. Купиняк. Тепловий стрес у тварин. – Київ: Аграрна наука, 2025. – 320 с.

6.2 Підручники

І. Петровська, Ю. Салига, І. Вудмаска. Статистичні методи в біологічних дослідженнях: навчально-методичний посібник. Київ: Аграрна наука, 2022. 172 с.

Н.В. Хміль, Г.В. Шестопалова, В.Г. Колесніков. Основи молекулярної та клітинної біофізики: Навчальний посібник для студентів ЗВО. – Харків: ХНУРЕ, 2023. – 255 с.

6.3 Тематичні збірники

Ігор Петрович Омелян. Бібліографічний покажчик. – Відп. ред.: Т.М. Брик, І.М. Мриглод, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2021. – 39 с.

Ярослав Йосифович Шур. Бібліографічний покажчик. – Відп. ред.: Т.М. Брик, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2022. – 29 с.

Тарас Михайлович Брик. Бібліографічний покажчик. – Відп. ред.: І.М. Мриглод, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2023. – 61 с.

Ярослав Миколайович Ільницький. Біобібліографічний покажчик. – Відп. ред.: Т.М. Брик, О.Л. Іванків. – Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2024. – 60 с.

6.4 Розділи в монографіях

O.M. Tovkach, S.B. Chernyshuk and B.I. Lev. Colloidal Particles in Confined and Deformed Nematic Liquid Crystals: Electrostatic Analogy and Its Implications. Chapter 5. In book: Soft Matter Systems for Biomedical Applications. – Springer. – 2022. ISBN: 978-3-030-80924-9, www.springer.com/series/361

6.5 Докторські дисертації

О.В. Величко Застосування квантових ґраткових моделей для опису систем з адсорбованими чи інтеркальованими частинками та оптичних ґраток. 01.04.07 – фізика твердого тіла, ІФКС НАН України, 2021.

А.С. Вдович Вплив електричних полів і механічних напружень на фізичні властивості сегнетоактивних сполук типу лад-безлад. 01.04.07 – фізика твердого тіла, ІФКС НАН України, 2021.

М.А. Шпот Критична поведінка просторово-неоднорідних систем. 01.04.02 – теоретична фізика, ІФКС НАН України, 2021.

С.М. Перепелиця Структура та динаміка впорядкування протийонів навколо подвійної спіралі ДНК. 01.04.02 – теоретична фізика, 03.00.02 –

біофізика (фіз.-мат. науки), ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, КНУ імені Тараса Шевченка, 2023.

В.А. Пашинська Мас-спектрометричні маркери та молекулярно-фізичні механізми дії біологічно активних речовин. 03.00.02 – біофізика, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, ХНУ ім. В.Н. Каразіна, 2023.

Т.М. Верхоляк Квантові флуктуації та фрустрації у низьковимірних спінових моделях: точні результати і пертурбативний аналіз. 01.04.02 – теоретична фізика, ІФКС НАН України, 2025.

Х.А. Гайдуківська Характеристика розміру та форми в статистичному описі полімерних структур. 01.04.02 – теоретична фізика, ІФКС НАН України, 2025.

М.Б. Красницька Колективна поведінка на складних мережах: фундаментальні аспекти та застосування. 01.04.02 – теоретична фізика, ІФКС НАН України, 2025.

6.6 Членство в Національній академії наук України

Ю.В. Головач дійсний член Національної академії наук України за спеціальністю «теоретична фізика» по Відділенню фізики і астрономії (обраний 2021 року).

Б.І. Лев дійсний член Національної академії наук України за спеціальністю «теоретична фізика» по Відділенню фізики і астрономії (обраний 2021 року).

В.І. Слісенко дійсний член Національної академії наук України за спеціальністю «ядерна енергетика» по Відділенню ядерної фізики та енергетики (обраний 2021 року).

М.В. Бондар дійсний член Національної академії наук України за спеціальністю «експериментальна фізика» по Відділенню фізики і астрономії (обраний 2024 року).

Т.М. Брик член-кореспондент Національної академії наук України за спеціальністю «комп'ютерне моделювання фізичних процесів, машинне навчання» по Відділенню фізики і астрономії (обраний 2024 року).

6. Довідкові матеріали

О.І. Корнелюк член-кореспондент Національної академії наук України за спеціальністю «біохімія, молекулярна біологія» по Відділенню біохімії, фізіології і молекулярної біології (обраний 2024 року).

С.І. Оковитий член-кореспондент Національної академії наук України за спеціальністю «комп'ютерне моделювання фізичних процесів, машинне навчання» по Відділенню фізики і астрономії (обраний 2024 року).

В.Г. Назаренко член-кореспондент Національної академії наук України за спеціальністю «фізика м'якої речовини» по Відділенню фізики і астрономії (обраний 2025 року).

А.Г. Сотніков член-кореспондент Національної академії наук України за спеціальністю «обчислювальна фізика атомних та ядерних систем» по Відділенню ядерної фізики та енергетики (обраний 2025 року).

6.7 Участь у роботі вітчизняних наукових рад і комітетів

Науковий комітет Національної ради України з питань розвитку науки і технологій (члени: Л.М. Лисецький (2021), Ю.В. Слюсаренко (2021–2023), А.Д. Трохимчук (2021–2025, в т.ч. секретар: 2023–2025), С.Й. Вільчинський (від 2025)).

Національне агентство з забезпечення якості вищої освіти (член Галузевої експертної ради, галузь знань 10. Природничі науки: А.Д. Трохимчук (2021–2024)).

Ідентифікаційний комітет з питань науки при Кабінеті Міністрів України (голова: Ю.В. Головач, член: С.О. Єсилевський) (від 2024).

Національний фонд досліджень України (член Наукової ради: Ю.В. Калюжний (2021–2022), А.Г. Сотніков (від 2025)).

Президія Національної академії наук України (президент НАН України: А.Г. Загородній, член Президії: М.В. Бондар (від 2025)).

Комітет з Державних премій України в галузі науки і техніки (голова: А.Г. Загородній, член: С.І. Оковитий).

Комісія з присудження премій та іменних стипендій Верховної Ради України (член: І.М. Мриглод (2021–2024)).

Бюро Відділення фізики і астрономії НАН України (академік-секретар: М.В. Бондар, заступник академіка-секретаря: С.М. Перепелиця, член: Т.М. Брик).

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

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

Рада Західного наукового центру НАН та МОН України (керівник відділення фізико-технічних і математичних наук: І.М. Мриглюд, керівник секції фізики і астрономії: Ю.В. Головач).

Наукове товариство імені Шевченка (заступник голови, член Президії: І.М. Мриглюд, заст. голови комісії фізики: Ю.В. Головач).

Наукова рада з проблеми «Фізика металічного стану» при Відділенні фізики і астрономії (член бюро ради: В.В. Лізунов; члени ради: Л.А. Булавін, І.М. Мриглюд, Б.І. Лев, В.М. Антонов, В.Й. Сугаков, М.І. Лебовка):

- секція «Теорія металічних систем» (члени: І.М. Мриглюд, В.М. Антонов, Т.М. Брик, В.Й. Сугаков, А.М. Швайка);
- секція «Фізичні основи діагностики матеріалів» (заст. голови: В.В. Лізунов, члени: Л.А. Булавін, В.Л. Карбівський);
- секція «Наноструктуровані та аморфні матеріали» (члени: Б.І. Лев, В.М. Антонов, М.І. Лебовка, В.Л. Карбівський, В.К. Носенко);
- секція «Фізика фазових і структурних перетворень» (член: В.К. Носенко).

Наукова рада з проблеми «Фізика низьких температур і кріогенна техніка» при Відділенні фізики і астрономії (член бюро ради: С.С. Соколов):

- секція «Фізика квантових рідин та кристалів» (члени: С.С. Соколов, В.К. Чаговець, Ю.В. Слюсаренко, С.Й. Вільчинський);
- секція «Фізика магнітних явищ» (член: О.В. Держко);
- секція «Електронні властивості твердих тіл» (член: В.М. Антонов);
- секція «Фізика молекулярних кристалів» (члени: Л.А. Булавін, Г.І. Довбешко, В.О. Карачевцев, О.І. Кривчіков).

Експертна рада МОН з питань атестації наукових кадрів з фізико-математичних наук (члени: Л.М. Лисецький, В.В. Лізунов, Т.М. Пацаган).

6.8 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 (Ветоу, Німеччина).
- Т.М. Брик** – член Міжнародного дорадчого комітету з проблеми «Рідкі і аморфні метали», спостерігач Керівної Ради Європейського центру атомістичних та молекулярних обчислень СЕСАМ (Лозанна, Швейцарія).
- Ю.В. Головач** – співкерівник Міжнародного коледжу докторантів «Статистична фізика складних систем» (Львів, Ляйпціг, Нансі, Ковентрі); член: Дорадчої ради середньоевропейської співпраці у галузі статистичної фізики (МЕСО); The Dutch Research Council, NWO Domain Science – M grants (2023); Акції TD1210 COST (European Cooperation in Science and Technology) «Аналіз динаміки ландшафтів інформації і знання – KnowEscape», Complexity Science Hub (Vienna, Austria).
- М.Ф. Головки** – 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), Optica (formerly OSA).
- В.О. Мазур** – член наукової ради Міжнародного центру з тепло- і масообміну (ICHMT – International Center for Heat and Mass Transfer).
- В.Г. Назаренко** – член програмного комітету і член ради директорів Товариства з інформаційних дисплеїв (Society for Information Display).
- Т.М. Пацаган** – представник від України до програмних комітетів Рамкової програми Європейського Союзу з досліджень та інновацій «Горизонт Європа» (комітет Дії Марії Склодовської-Кюрі) (2024–2025).

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).

А.Д. Трохимчук – спостерігач Керівної Ради Європейського центру атомістичних та молекулярних обчислень СЕСАМ (Лозанна, Швейцарія).

6.9 Членство у редколегіях журналів

Advances in Condensed Matter Physics (члени редколегії: Ю.В. Головач, О.В. Держко).

Biophysical Bulletin (головний редактор: М.В. Косевич, члени редколегії: Г.І. Довбешко, В.О. Карачевцев, О.І. Корнелюк, Л.М. Лисецький, Г.В. Шестопалова).

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

Condensed Matter Physics (головний редактор: І.М. Мриглод; заст. головного редактора: Т.М. Брик, Ю.В. Головач, М.Ф. Головка, О.В. Держко, Я.М. Ільницький, Я.Й. Щур, А.М. Швайка; відп. секретар: О.В. Пацаган; члени редколегії: А.Б. Баумкетнер, М.Л. Дудка, А.Г. Загородній, Ю.В. Калюжний, М.П. Козловський, М.І. Лебовка, Т.М. Пацаган, Ю.В. Слюсаренко, М.В. Токарчук, А.Д. Трохимчук).

East Europeann Journal of Physics (члени редколегії: Л.А. Булавін, Ю.В. Слюсаренко).

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

Frontiers in Bioengineering and Biotechnology (член редколегії: Ю.Т. Салига).

Frontiers in Molecular Biosciences (член редколегії: Ю.Т. Салига).

6. Довідкові матеріали

Frontiers in Physics (член редколегії: Т.М. Брик).

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

International Journal of Design & Nature and Ecodynamics (член редколегії: Л.С. Брижик).

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

Mathematical Modeling and Computing (члени редколегії: Т.М. Брик, І.М. Мриглод, М.В. Токарчук).

Open Physics (члени редколегії М.Ф. Головка, І.М. Мриглод, А.М. Швайка).

Physics and Chemistry of Solid State (член редколегії М.Ф. Головка).

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

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

Біологія тварин (головний редактор: Т.Ю. Салига).

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

Вісник аграрної науки (член редколегії: Ю.Т. Салига).

Вісник НАН України (головний редактор: А.Г. Загородній; член редколегії: М.В. Бондар).

Доповіді Національної академії наук України (член редколегії: Б.І. Лев).

Журнал фізичних досліджень (головний редактор: В.М. Ткачук; заст. головного редактора: Ю.О. Плевачук; члени редколегії: Ю.В. Головач, О.В. Держко, О.В. Чалий).

Металофізика і новітні технології (заст. гол. редактора: В.В. Лізунов; член редколегії: Т.М. Брик).

Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології (відп. секретар: В.В. Лізунов).

Полімерний журнал (член редколегії: М.І. Лебовка).

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

Успіхи фізики металів (відп. секретар: В.В. Лізунов; член редколегії: Т.М. Брик).

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

Фізичний збірник НТШ (члени редколегії: Ю.В. Головач, О.Л. Іванків, І.М. Мриглюд).

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

Ядерна фізика та енергетика (гол. редактор: В.І. Слісенко; заст. головного редактора: В.Й. Сугаков; член редколегії: Л.А. Булавін).

6.10 Відзнаки: премії та нагороди

6.10.1 Премії

Премія НАН України імені О.С. Давидова (2022 р.) за цикл робіт «Вивчення механізмів утворення комплексів біологічно активних молекул з молекулами ДНК та білків» (С.Н. Волков, С.М. Перепелиця (ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України), Г.В. Шестопалова (ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України)).

Премія НАН України імені О.І. Ахієзера (2024 р.) за монографію «Теорія екзотичних станів у квантових фермі- та бозе-системах» (О.С. Пелетинський, Ю.В. Слюсаренко, А.Г. Сотніков (ННЦ ХФТІ НАН України)).

Премія Верховної Ради України молодим вченим (2023 р.): за роботу «Вплив полідисперсності та пористого середовища на фазову поведінку простих та асоціативних рідин» (Т.В. Гвоздь, ІФКС НАН України); за роботу «Кооперативна поведінка та скейлінг у рівноважній та нерівноважній статистичній фізиці» (Д.Ю. Шаповал, ІФКС НАН України).

Стипендія імені академіка НАН України Б.Є. Патона для молодих вчених Національної академії наук України (2023): М.Б. Красницька, ІФКС НАН України.

6. Довідкові матеріали

Стипендія імені академіка НАН України Б.Є. Патона для молодих вчених Національної академії наук України (2024): В.О. Харченко, ІПФ НАН України.

6.10.2 Державні нагороди

А.Г. Загородній: орден «За заслуги» І ст. (2021 р.).

В.К. Носенко: орден «За заслуги» ІІІ ст. (2025 р.).

6.10.3 Відомчі та локальні відзнаки

А.Б. Баумкетнер: відзнака НАН України «За професійні здобутки» (2023), диплом лауреата обласної премії для працівників наукових установ та закладів вищої освіти Львівської області (2023).

Т.М. Брик: відзнака НАН України «За підготовку наукової зміни» (2023), диплом лауреата обласної премії для працівників наукових установ та закладів вищої освіти Львівської області (2023).

Ю.В. Головач: відзнака НАН України «За професійні здобутки» (2023), диплом лауреата обласної премії для працівників наукових установ та закладів вищої освіти Львівської області (2023).

М.Ф. Головка: подяка НАН України (2023), диплом лауреата обласної премії для працівників наукових установ та закладів вищої освіти Львівської області (2023).

Т.В. Демчук: відзнака НАН України «Талант, натхнення, праця» (2024), диплом лауреата премії Львівської облдержадміністрації та облради для молодих вчених (2021).

О.Л. Іванків: відзнака НАН України «За професійні здобутки» (2021), подяка НАН України (2025).

Я.М. Ільницький: відзнака НАН України «За підготовку наукової зміни» (2023), подяка НАН України (2022).

Ю.В. Калюжний: відзнака НАН України «За наукові досягнення» (2021), диплом лауреата обласної премії для працівників наукових установ та закладів вищої освіти Львівської області (2023).

6.11. Проведення міжнародних та національних конференцій

М.П. Козловський: відзнака НАН України «За наукові досягнення» (2022).

І.М. Мриглюд: подяка НАН України (2021), подяка Львівського міського голови (2021).

О.В. Пацаган: диплом лауреата обласної премії для працівників наукових установ та закладів вищої освіти Львівської області (2023).

Ю.Т. Салига: подяка Президії НААН України (2021), подяка Львівської міської ради (2021), почесна грамота Президії НААН України (2022).

М.В. Токарчук: подяка НАН України (2021).

Я.Й. Шур: почесна грамота Президії НАН України (2022).

І.Р. Юхновський: відзнака НАН України «За сприяння розвитку науки» (2021).

6.10.4 Почесні доктори та члени товариств

А.Г. Загородній: почесний академік АН вищої школи України (2022).

6.11 Проведення міжнародних та національних конференцій

Наукова сесія «Актуальні проблеми теорії асоційованих рідин» (до 70-річчя Ю. Калужного), 3 вересня 2021, Львів, ІФКС НАН України (І. Мриглюд, М. Головка).

Yuri Gaididei memorial workshop, February 2–3, 2022, Kyiv, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of NAS of Ukraine (Л.С. Брижик).

Меморіальний семінар до 60-річчя Ігора Омеляна, 24 січня 2022, Львів, ІФКС НАН України, (І. Мриглюд, М. Токарчук, О. Іванків).

International Conference «US – Ukraine Quantum Forum 2023», Харків, 28–31 серпня 2023 р. (онлайн), (А.Г. Сотніков, ННЦ ХФТІ НАН України).

Workshop «Dynamics and Thermodynamics of Disordered and High-Pressure Matter (ТВ60)» dedicated to the 60th anniversary of T. Bryk, August 29, 2023, Lviv, ICMP of NAS of Ukraine (І. Мриглюд, А. Трохимчук, О. Іванків).

6. Довідкові матеріали

Round Table «Frontiers in Science: Hot topics in research, management, and financing» (JaI60), October 10, 2023, Lviv, Ukraine, ICMP of NAS of Ukraine (Я. Ільницький, Т. Бриж).

Bogolyubov Kyiv Conference «Problems of Theoretical and Mathematical Physics» dedicated to the 115th anniversary of M.M. Bogolyubov (1909–1992), September 24–26, 2024, Kyiv, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of NAS of Ukraine (А.Г. Загородній, Л.С. Брижик, Т.М. Бриж, О.В. Чалий, Б.І. Лев, І.М. Мриглод, С.М. Перепелиця, Е.Г. Петров, Ю.В. Слюсаренко, І.Р. Юхновський, В.І. Засенко).

1st Annual Workshop on the Use of Computer Simulations in Nanophysics «Nanophysics Meets Computer Simulations», November, 8, 2024, Lviv, Ukraine, ICMP of NAS of Ukraine (А. Баумкетнер).

Satellite Conference of StatPhys-29 «Statistical Physics in Lviv», June, 30 – July, 3, 2025, Lviv, Ukraine, Yukhnovskii ICMP of NAS of Ukraine (Л.С. Брижик, С.М. Перепелиця, Т.М. Бриж).

The 6th Conference «Statistical Physics: Theory and Computer Simulations» dedicated to the 100th anniversary of professor Ihor Yukhnovskii, August 27–29, 2025, Lviv, Ukraine, Yukhnovskii Institute for Condensed Matter Physics of NAS of Ukraine (А. Загородній, М. Головка, Ю. Слюсаренко, Т. Бриж, І. Мриглод, М. Дудка, Т. Пацаган, А. Баумкетнер, В. Блавацька, Т. Демчук, О. Держко, Ю. Головач, Я. Ільницький, О. Іванків, А. Швайка, В. Ткачук, А. Трохимчук).

XXVII–XXXI Давидовські читання з теоретичної фізики (Київ, Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, 28.12.2021; 26.12.2022; 21.12.2023; 26.12.2024; 29.12.2025) (Л.С. Брижик).

I–III Стасюкові читання з фізики твердого тіла (I – 28 вересня 2023; II – 27 вересня 2024; III – 3 жовтня 2025), Львів, ІФКС НАН України (О.Держко, О. Іванків).

II–V International Conference «Condensed Matter & Low Temperature Physics» (CM<P 2021, June 6–12, 2021; CM<P 2023, June 5–11, 2023; CM<P 2024, June 3–7, 2024; CM<P 2025, June 2–6, 2025) Харків, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України (В. Карачевцев, С. Соколов).

23rd–27th Annual Workshops on Phase Transitions and Critical Phenomena «Ising Lectures» (23rd, May 18–20, 2021; 24th, May 17–19, 2022; 25th, May

6.11. Проведення міжнародних та національних конференцій

9–11, 2023; 26th, May 14–16, 2024; 27th, May 13–15, 2025) (Ю.В. Головач, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

VII–IX International Conference «Nanobiophysics: Fundamental and applied aspects» (NBP-2021, 4–8 October 2021; NBP-2023, 3–6 October 2023; NBP-2025, 6–9 October 2025), Kharkiv, Ukraine, B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of NAS of Ukraine (В. Карачевцев – голова, члени оргкомітету: О. Чалий, Г. Довбешко, О. Корнелюк, М. Косевич, Л. Лисецький, С. Перепелиця, Е. Петров, Г. Шестопалова, Р. Стойка, С. Волков).

XVI–XX Робоча нарада з актуальних проблем фізики м'якої речовини (XVI, 21–22 вересня 2021 (Т. Брик, О. Кривчиков, М. Головка, Я. Ільницький, А. Трохимчук); XVII, 9 грудня 2022; XVIII, 3 листопада 2023; XIX, 29 листопада 2024; XX, 11–12 грудня 2025) Львів, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України (М. Головка, І. Мриглод, Т. Брик, Т. Пацаган).

XII–XV Conference of Young Scientists «Problems of Theoretical Physics» (Kyiv, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of NAS of Ukraine, December 21–23, 2021; December 21, 2022; January 16–17, 2024; June 10–12, 2025 ((А.Г. Загородній, С.М. Перепелиця).

XXI–XXV Всеукраїнська школа-семинар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (11–12 жовтня 2021; 24–25 листопада 2022; 26–27 жовтня 2023; 24–25 жовтня 2024; 30–31 жовтня 2025), Львів, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України (Т. Демчук).

Щомісячний семінар «Обрії науки» (2021–2025) sites.google.com/view/seminar-horizons-of-science/home (Ю.В. Головач, ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України).

Круглий стіл «Історія біофізики у Харкові» (в рамках NBP-2025), 8 жовтня 2025, ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України (В. Карачевцев, М. Косевич).

7 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

Альошін 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.)

Агамась 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

Баумкетнер Андрій Богданович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Южновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 м. Львів
E-mail: andrij@ictp.lviv.ua
Тел.: +380 32 2701496

Бистренко Олексій Васильович

Інститут проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича НАН України,

вул. Омеляна Прицака, 3, 03680, м. Київ
Тел.: +380 44 2057954

Блавацька Вікторія Богданівна

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: viktorija@icmp.lviv.ua
Тел./факс: +380 32 2707401

Бондар Михайло Віталійович

Інститут фізики НАН України,
пр. Науки, 46, 03039, м. Київ
E-mail: mike_bondar@iop.kiev.ua
Тел.: +380 44 5251220, +38 095 6937719

Брижик Лариса Свиридівна

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-б, 03143, м. Київ
E-mail: brizhik@bitp.kyiv.ua
Тел.: +38 044 5213154 (роб.), +38 066 786 05 30 (моб.)
sites.google.com/view/larissabrizhik

Брик Тарас Михайлович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: bryk@icmp.lviv.ua
Тел.: +380 32 2761978

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.: +380 44 5262427

Веселовський Микола Сергійович

Інститут фізіології ім. О.О. Богомольця НАН України,
вул. Богомольця, 4, 01024, м. Київ

7. Контактна інформація

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

ім. І.Р. Юхновського НАН України,

вул. Свенціцького 1, 79011, м. Львів

E-mail: hol@icmp.lviv.ua

Тел.: +380 32 2760908

Головко Мирослав Федорович

Інститут фізики конденсованих систем

ім. І.Р. Юхновського НАН України,

вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів

E-mail: holovko@icmp.lviv.ua

Тел.: +380 32 2760614

Гоцульський Володимир Якович

Одеський національний університет ім. І.І. Мечнікова,

кафедра фізики та астрономії,

вул. Дворянська, 2, 65082, м. Одеса

E-mail: vgotzulskiy@gmail.com

Тел.: (048) 723-62-12

Демчук Тарас Васильович

Інститут фізики конденсованих систем

ім. І.Р. Юхновського НАН України,

вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів

E-mail: demchuk@icmp.lviv.ua

Держко Олег Володимирович

Інститут фізики конденсованих систем

ім. І.Р. Юхновського НАН України,

вул. Свенціцького, 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

Дорошенко Ірина Юріївна

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,

фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики,

пр. академіка Глушкова, 2, корп. 1, 03022 м. Київ

E-mail: dori11@ukr.net

7. Контактна інформація

Дудка Максим Леонідович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: maxdudka@icmr.lviv.ua
Тел.: +380 32 2707401

Єсилевський Семен Олександрович

Інститут фізики НАН України,
пр. Науки, 46, 03039, м. Київ
E-mail: yesint4@gmail.com

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, 14-6, 03143, м. Київ
E-mail: azagorodny@bitp.kyiv.ua
Тел.: +380 44 5265362

Засенко Володимир Іванович

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-6, 03143, м. Київ
E-mail: zassenko@bitp.kyiv.ua
Тел.: +38 044 521 34 08

Іванків Олександр Львович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: oiva@icmr.lviv.ua
Тел.: +380 32 2761978

Ільницький Ярослав Миколайович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,

вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: iln@icmr.lviv.ua
Тел.: +380 32 2761978

Калюжний Юрій Володимирович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: yuka1@icmr.lviv.ua
Тел.: +380 32 2760614

Капітанчук Олексій Леонідович

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-Б, 03143, м. Київ
E-mail: alkart@bitp.kyiv.ua
Тел.: +380 44 5213449

Карачевцев Віктор Олексійович

Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б.І. Веркіна НАН України,
пр. Науки 47, 61103, м. Харків
E-mail: karachevtsev@ilt.kharkov.ua
Тел.: 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
Тел: +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

7. Контактна інформація

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
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: mpk@ictp.lviv.ua
Тел.: +380 32 2760908

Корнелюк Олександр Іванович

Інститут молекулярної біології і генетики НАН України,
вул. Акад. Заболотного, 1450 03627, м. Київ
E-mail: kornelyuk@imbg.org.ua
Тел.: +380 44 5265589

Кривчиків Олександр Іванович

Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б.І. Веркіна НАН України,
пр. Науки 47, 61103, м. Харків
E-mail: krivchikov@ilt.kharkov.ua

Лазаренко Максим Михайлович

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики,
пр. академіка Глушкова, 4, 03022, м. Київ
E-mail: lazmaxs@knu.ua

Лебовка Микола Іванович

Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України,
бульв. Вернадського, 42, 03142, м. Київ
E-mail: lebovka@gmail.com
Тел.: +380 44 4240378

Лев Богдан Іванович

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна 146, 03143, м. Київ

E-mail: bohdan.lev@gmail.com

Тел.: 097 321 87 33

Лисецький Лонгін Миколайович

Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України,

пр. Науки, 60, 61072, м. Харків

E-mail: lsciencefox@gmail.com, lisetski@kharkiv.ua

Лізунов Вячеслав Вячеславович

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,

бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142, м. Київ

E-mail: lizunov.vyacheslav@gmail.com, lizunov@imp.kiev.ua,

Тел.: +380 44 4242210

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@paso.net

Тел./факс: +380 48 7209169

Маломуж Микола Петрович

Одеський національний університет ім. І.І. Мечнікова,

кафедра теоретичної фізики та астрономії,

вул. Дворянська, 2, 65082, м. Одеса

E-mail: mmp@onu.edu.ua

Микитюк Зіновій Матвійович

Національний університет «Львівська політехніка»,

вул. С. Бандери, 12, 79013, м. Львів

E-mail: Zynovii.Mukytiuk@lpnu.ua

Тел.: +380 32 2582173

Момот Андрій Іванович

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,

7. Контактна інформація

фізичний факультет, кафедра функціональних матеріалів,
вул. Володимирська, 64, 01033, м. Київ
E-mail: momot.andriy@gmail.com

Мриглод Ігор Миронович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: mryglod@icmp.lviv.ua
Тел.: +380 32 2761978

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.: +380 32 2394594 (роб)

Назаренко Василь Геннадійович

Інститут фізики НАН України,
пр. Науки 46, 03039, м. Київ
E-mail: vnazaren@iop.kiev.ua
Тел.: +380 44 5251593

Настішин Юрій Адамович

Національна академія сухопутних військ імені Петра Сагайдачного,
вул. Героїв Майдану, 32, 7901, м. Львів
E-mail: nastyshyn_yuriy@yahoo.com
Тел.: +380 32 2611483

Ніколаєнко Тимофій Юрійович

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
фізичний факультет, кафедра молекулярної фізики,
просп. академіка Глушкова, 2, корп. 1, 03022 м. Київ
E-mail: tim.n@knu.ua
Тел.: +380 44 5213206

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.: +380 44 4243505

Оковитий Сергій Іванович

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
просп. Науки, 72, 49045, м. Дніпро

E-mail: sokovyty@icnanotox.org, rector@dnu.dp.ua

Тел.: (056) 3749800, (056) 3749801

Пацаган Оксана Вадимівна

Інститут фізики конденсованих систем

ім. І.Р. Юхновського НАН України,

вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів

E-mail: oksana@ictp.lviv.ua

Тел.: +380 32 2760908

Пацаган Тарас Миколайович

Інститут фізики конденсованих систем

ім. І.Р. Юхновського НАН України,

вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів

E-mail: tarpa@ictp.lviv.ua

Тел.: +380 32 2760614

Пергаменщик Віктор Михайлович

Інститут фізики НАН України,

пр. Науки 46, 03039, м. Київ

E-mail: victorpergam@yahoo.com

Тел.: +38 096 5213991 (моб.)

Перепелиця Сергій Миколайович

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,

вул. Метрологічна, 14-б, 03143, м. Київ

E-mail: perepelytsya@bitp.kyiv.ua

Тел.: +380 44 5213423

Петров Ельмар Григорович

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,

вул. Метрологічна, 14-б, 03143, м. Київ

E-mail: epetrov@bitp.kyiv.ua

Тел.: +380 44 5269881

7. Контактна інформація

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.: +38 067 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.: +380 44 5264587

Ребеш Анастасія Петрівна

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14б, 03143, м. Київ
E-mail: rebesh@gbitp.kyiv.ua
Тел.: +38 098 3629681

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.: +380 44 5213574

Рудавський Едуард Якович

Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б.І. Веркіна НАН України,
пр. Науки 47, 61103, м. Харків
E-mail: rudavskii@ilt.kharkov.ua

Салига Юрій Тарасович

Інститут біології тварин НААН України,
вул. Василя Стуса, 38, 79034, м. Львів
E-mail: yursalyha@yahoo.com
Тел.: +38 067 3085912

Сарканич Петро Васильович

Інститут фізики конденсованих систем

ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: petrosark@icmp.lviv.ua
Тел.: +380 32 2707401

Слісенко Василь Іванович

Інститут ядерних досліджень НАН України,
пр. Науки, 47, 03028, м. Київ
E-mail: slisenko@kinr.kiev.ua
Тел.: +380 44 5255035

Слюсаренко Юрій Вікторович

ІНЦ 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, yuv6700@gmail.com

Соколов Святослав Сергійович

Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б.І. Веркіна 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 НАН України,
пр. Науки, 41, 03028, м. Київ
E-mail: vsorokin@isp.kiev.ua
Тел.: +380 44 5255785

Сотніков Андрій Геннадійович

ІНЦ Харківський фізико-технічний інститут НАН України,
Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера,
вул. Академічна, 1, 61108, м. Харків
E-mail: a_sotnikov@kipt.kharkov.ua
Тел.: +380 66 2744587

Стойка Ростислав Стефанович

Інститут біології клітини НАН України,

7. Контактна інформація

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

Ткачук Володимир Михайлович

Львівський національний університет імені Івана Франка,
фізичний факультет,
кафедра теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука,
вул. Драгоманова, 12, 79005, м. Львів
E-mail: voltkachuk@gmail.com
Тел.: +380 32 2394183

Токарчук Михайло Васильович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: mtok@icmp.lviv.ua
Тел.: +380 32 2707401

Трохимчук Андрій Дмитрович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: adt@icmp.lviv.ua
Тел.: +380 032 2760614

Трусова Валерія Михайлівна

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна,

кафедра медичної фізики та біомедичних нанотехнологій,
майдан Свободи 4, 61022, Харків
E-mail: valerija.trusova@karazin.ua

Ушкац Михайло Вікторович

Національний університет кораблебудування
імені адмірала Макарова,
кафедра інформаційних управляючих систем і технологій,
просп. Героїв України, 9, 54007, м. Миколаїв
E-mail: mykhailo.ushcats@nuos.edu.ua

Харченко Василь Олегович

Інститут прикладної фізики НАН України,
вул. Петропавлівська, 58, 40000, м. Суми
E-mail: vasiliiy@ipfcentr.sumy.ua

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

Чаговець Валерій Костянтинович

Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б.І. Веркіна НАН України,
пр. Науки 47, 61103, м. Харків
E-mail: chagovets@ilt.kharkov.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.: 044 4544921 (роб), 050 9624939 (моб)

Чернишук Станіслав Борисович

Інститут фізики НАН України,
пр. Науки 46, 03039, м. Київ
E-mail: stasubf@gmail.com
Тел.: 044 5240496

7. Контактна інформація

Швайка Андрій Михайлович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: ashv@icmp.lviv.ua
Тел.: +380 032 2761054

Шестопалова Ганна Вікторівна

Інститут радіофізики та електроніки
ім. О.Я. Усикова НАН України,
вул. академіка Проскури, 12, 61085, м. Харків
E-mail: avshestopalova1@gmail.com
Тел.: +38 063 8333037

Щур Ярослав Йосифович

Інститут фізики конденсованих систем
ім. І.Р. Юхновського НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011, м. Львів
E-mail: shchur@icmp.lviv.ua, ya.shchur@gmail.com

Науково-інформаційне видання
Наукова рада з проблеми «Фізика м'якої речовини».
Короткий підсумок діяльності протягом 2021–2025 років

Відповідальний редактор
І.М. Мриглод

© Інститут фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України
Львів, 2026

Укладання: Олександр Іванків

Комп'ютерне макетування: Олег Величко

Графічне оформлення: Олег Величко

Формат 84×108/32. Ум. друк. арк. 14,0.
Друк офсетний.