



Львів, 11-12 жовтня 2021

**21-та Всеукраїнська
школа-семінар та
Конкурс молодих вчених**

**зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини**

Збірка тез



**Інститут фізики конденсованих систем
НАН України**

**XXI Всеукраїнська школа-семінар
та Конкурс молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2021**

Львів, 11–12 жовтня 2021 р.

Інститут фізики конденсованих систем НАН України

ПРОГРАМА ТА ТЕЗИ

Львів — 2021

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

У рамках Школи-семинару відбуватиметься Конкурс на здобуття індивідуальних премій за кращі наукові роботи та виступи.

В програмі:

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

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

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

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

Робоча мова семинару — українська.

Адреса для контактів

Рада молодих вчених ІФКС НАН України

вул. Свенціцького, 1

79011 Львів, Україна

Тел: +38 032 2761978

Факс: +38 032 2761158

Електронна пошта: rmv@icmp.lviv.ua, icmp.cys@gmail.com

Веб-сторінка конкурсу: <http://www.icmp.lviv.ua/konkurs/>

Рада молодих вчених: <http://www.icmp.lviv.ua/icmp/cys/>

**XXI Всеукраїнська школа-семінар
та Конкурс молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2021**

Програма

Львів, 11–12 жовтня 2021 р.

Понеділок, 11 жовтня 2021 р.

Ранкові засідання 09:00 – 13:05

09:00 – 09:10 ТАРАС МИХАЙЛОВИЧ БРИК
Вітальне слово від організаторів
ІФКС НАН України, Львів

Засідання I

Головує М.І. ЛЕБОВКА

09:10 – 10:10 Запрошена лекція
Юлія Олександрівна СЕТИ
**Теорія спектральних властивостей багатокаскадного
елемента квантового каскадного детектора у різних
моделях**
ЧНУ ім. Ю. Федьковича, Чернівці

10:10 – 10:30 Конкурсна доповідь
АРСЕН ШУТОВСЬКИЙ
**Залежність густини струму від різниць фаз у
тунельних надпровідних контактах типу SIS на основі
двощілинних надпровідників**
ВНУ ім. Л. Українки, Луцьк

10:30 – 10:45 ОКСАНА ДОБУШ
**Фазова поведінка коміркової моделі з потенціалом
Кюрі-Вейса**
ІФКС НАН України, Львів

10:45 – 11:00 МАР'ЯНА КРАСНИЦЬКА
**Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна на
безмасштабній мережі**
ІФКС НАН України, Львів
L⁴ Collaboration & Doctoral College, Europe

11:00 – 11:20 Перерва

Понеділок, 11 жовтня 2021 р.
Ранкові засідання 9:00 – 13:05

Засідання II

Головує Ю.О. СЕТИ

- 11:20 – 12:20 Запрошена лекція
СВЯТОСЛАВ ВАСИЛЬОВИЧ КОНДРАТ
**Physics and modelling of ionic liquids in narrow
conducting confinements**
Institute of Physical Chemistry, Warsaw, Poland
- 12:20 – 12:35 ТАРАС ГУТАК
**Термодинамічні і динамічні властивості $S = 1/2$ моделі
Гайзенберга на пилкоподібному ланцюжку**
ІФКС НАН України, Львів
- 12:35 – 12:50 МАРІЯ КОРВАЦЬКА
**Дослідження впливу пористого середовища на
дифузюю плин у твердих сферах**
ІФКС НАН України, Львів
- 12:50 – 13:05 МАРІЯ КОПЧА
**Колективна динаміка в іонних рідинах: теорія і
комп'ютерне моделювання**
ІФКС НАН України, Львів
- 13:05 – 14:00 Обідня перерва

Понеділок, 11 жовтня 2021 р.
Вечірні засідання 14:00 – 15:45

Засідання III

Головує С.В. Кондрат

- 14:00 – 15:00 Запрошена лекція
МИКОЛА ІВАНОВИЧ ЛЕБОВКА
Самозбірка в упаковках з анізотричних частинок
ІБХ ім. Ф. Д. Овчаренка НАН України, Київ
- 15:00 – 15:15 ХРИСТИНА ГАЙДУКІВСЬКА
Кільцеві полімери на перколяційному кластері
ІФКС НАН України, Львів
- 15:15 – 15:30 ЮЛІАН ГОНЧАР
Ефекти середовища у термічній денатурації ДНК
ІФКС НАН України, Львів
L⁴ Collaboration & Doctoral College, Europe
ЦПСС, Університет Ковентрі, Ковентрі,
Великобританія
- 15:30 – 15:45 ТАРАС ДЕМЧУК
Особливості поздовжньої колективної динаміки
розплаву GaSb вздовж лінії плавлення: ab initio
комп'ютерне моделювання
ІФКС НАН України, Львів

Вівторок, 12 жовтня 2021 р.
Ранкові засідання 9:10 – 13:00

Засідання IV

Головує Х.П. ГНАТЕНКО

- 09:10 – 10:10 Запрошена лекція
СЕРГІЙ ГЕННАДІЙОВИЧ ШАРАПОВ
Thermoelectric and thermomagnetic phenomena: from history to the Nernst effect in the Laughlin and Corbino geometries
ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
- 10:10 – 10:30 Конкурсна доповідь
ДМИТРО ШАПОВАЛ
Скейлінг у моделях реакційно-дифузійних процесів та утворених структур у неоднорідних середовищах
ІФКС НАН України, Львів
L⁴ Collaboration & Doctoral College, Europe
- 10:30 – 10:45 ДМИТРО ЯРЕМЧУК
Магнітна енергія і фактор форми еластомера з неоднорідно намагніченими частинками
ІФКС НАН України, Львів
- 10:45 – 11:00 НАТАЛІЯ СУСУЛОВСЬКА
Дослідження багатокубітних графових станів на квантовому комп'ютері компанії ІВМ
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
SoftServe Inc., Austin, USA
- 11:00 – 11:20 Перерва

Вівторок, 12 жовтня 2021 р.

Ранкові засідання 9:10 – 13:00

Засідання V

Головує С.Г. ШАРАПОВ

- 11:20 – 12:20 Запрошена лекція
ХРИСТИНА ПАВЛІВНА ГНАТЕНКО
Квантові та класичні задачі у просторі з
деформованою алгеброю Гайзенберга
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 12:20 – 12:35 ОЛЕСЯ КРУПНІЦЬКА
**Міри запутаності та змішаності квантових станів
фрустрованого октаедричного ланцюжка Гайзенберга**
ІФКС НАН України, Львів
- 12:35 – 12:50 СВЯТОСЛАВ ТИМИК
**Визначення геометричної міри запутаності спінових
систем з взаємодією Гайзенберга на квантовому
комп'ютері компанії ІВМ**
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 12:50 – 13:00 YOUNG MINDS
- 13:00 – 15:00 Обідня перерва. Засідання комісії
- 15:00 – 16:00 Підбиття підсумків. Нагородження переможців.

**XXI Всеукраїнська школа-семінар
та Конкурс молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2021**

Конкурсні доповіді

Львів, 11–12 жовтня 2021 р.

Залежність густини струму від різниць фаз у тунельних надпровідних контактах типу SIS на основі двоцилінричних надпровідників

А. Шутовський, В.Є. Сахнюк

*Волинський національний університет імені Лесі Українки,
проспект Волі, 13, 43025 Луцьк, Україна,
E-mail: Shutovskyi.Arsen@vnu.edu.ua*

Метод функцій Гріна [1, 2] застосовано до тунельних надпровідних контактів типу SIS на основі двоцилінричних надпровідників. Процедура згладжування просторової поведінки функцій на довжинах порядку атомних розмірів застосовано з метою переходу від диференціальних рівнянь другого порядку для функцій Гріна в конфігураційному представленні до диференціальних рівнянь уже першого порядку для функцій Гріна в t -представленні, які також називаються квазікласичними рівняннями [3]. Отримані рівняння проінтегровано в рамках моделі з кусково-сталими параметрами впорядкування для кожної з двох надпровідних областей окремо, не накладаючи при цьому ніяких додаткових обмежень на прозорість діелектричного прошарку. Умови неперервності функцій Гріна при переході через контакти, тобто умови зшивання, використано з метою знаходження невідомих сталих інтегрування і самих функцій Гріна в t -представленні, через які подано також і вираз для густини струму. Нову аналітичну формулу для струм-фазової залежності використано з метою аналізу s_{++} симетрії та s_{\pm} симетрії параметрів впорядкування.

[1] А.В. Свідзинський, Пространственно-неоднородные задачи теории сверхпроводимости, Наука, Москва 1982.

[2] А.В. Свідзинський, Математичні методи теоретичної фізики, Ін-т теорет. фізики ім. М. М. Боголюбова, Київ 2009.

[3] А.В. Свідзинський, Мікроскопічна теорія надпровідності, Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк 2011.

Скейлінг у моделях реакційно-дифузійних процесів та утворених структур у неоднорідних середовищах

Д. Шаповал^{a, b}

^aІнститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна

^b \mathbb{L}^4 Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems, Leipzig-Lorraine-Lviv-Coventry, Europe

В роботі розглянуто декілька типів задач. Перший стосується реакційно-дифузійних процесів. Тут розглянуто дві задачі: у коагуляційно-дифузійному процесі частинок A (що можуть дифундувати на ґратці, а при зустрічі відбувається реакція коагуляції $A + A \rightarrow A$) досліджено перехід між дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим кооперативними режимами у присутності стохастичного скидання [1]; у другій задачі теоретико-польовими РГ методами досліджується скейлінгова поведінка густини та кореляційної функції частинок B у середовищі з рухомими пастками A : $A + B \rightarrow A$, що можуть коагулювати або взаємно анігілюють $A + A \rightarrow (\emptyset, A)$, а дифузія частинок моделюється польотами Леві [2].

Теоретико-польовими РГ методами досліджено вплив структурного безладу у магнітних системах, що описується моделлю з випадковою анізотропією з комбінованим розподілом осі локальної анізотропії, що включає, зокрема, випадки ізотропного розподілу та розподілу вздовж осей гіперкуба [3].

Останній тип задач стосується рівноважних властивостей декількох моделей статистичної механіки. Тут розглянуто рівноважні властивості двокомпонентних адсорбатів у ході двосортних реакцій $A + B \rightarrow \emptyset$, що протікають на ґратках з неоднорідними каталітичними властивостями: одновимірні ланцюжки з двома типами каталітичних елементів (зв'язки та вузли), розподілені випадково згідно двох типів безладу (відпалений та заморожений) [4] та псевдоґратки з каталітичними зв'язками з випадковим відпаленим просторовим розподілом і взаємодією між однорідними частинками: ґратки Бете та Хусімі [5].

[1] D. Shapoval et al, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **51**, 425002 (2018)

[2] V. Blavatska, M. Dudka, D. Shapoval, *in preparation* (2021)

[3] D. Shapoval et al, *Phys. Rev. B*, **101**, 064402 (2020)

[4] D. Shapoval et al, *Phys. Rev. E*, **102**, 032121 (2020)

[5] D. Shapoval et al, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **54**, 385003 (2021)

**XXI Всеукраїнська школа-семінар
та Конкурс молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2021**

Доповіді школи-семінару

Львів, 11–12 жовтня 2021 р.

Фазова поведінка коміркової моделі з потенціалом Кюрі-ВейсаО.А. Добуш, М.П. Козловський

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

Об'єктом цього дослідження є коміркова модель із середньопольовим потенціалом взаємодії. У недавніх публікаціях [1,2] ми довели, можливість математично строгого переходу від неперервної системи взаємодіючих частинок до такої моделі та точного розрахунку її великої статистичної суми. Тепер ми отримали явний точний вираз рівняння стану односоротної коміркової моделі з потенціалом Кюрі-Вейса. Встановили, що ця модель має послідовність фазових переходів першого роду при температурах нижче критичної T_c . Проаналізували механізм цих переходів на основі поведінки хімічного потенціалу як функції густини. Отримали і дослідили ізотерми, фазові діаграми та криві співіснування системи, а також визначили координати критичної точки та поведінку параметра порядку в перших трьох фазових переходах каскаду.

[1] Kozitsky Yu., Kozlovskii M, and Dobush O., Springer, In Modern Problems of Molecular Physics, 229-251 (2018).

[2] Kozitsky Yu.V., Kozlovskii M.P., Dobush O.A., Condens. Matter Phys., 23, 23502 (2020).

Модель Ізінга зі змінною довжиною спіна на безмасштабній мережіМ. Красницька^{ab}, Ю. Головач^{abc}

^a *Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна*

^b \mathbb{L}^4 *Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex
Systems, Leipzig-Lorraine-Lviv-Coventry, Europe*

^c *Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry, CV1
5FB, United Kingdom*

Ми запропонували нове узагальнення моделі Ізінга, коли сила (довжина) окремого спіну може змінюватися. Модель призначена для аналізу впорядкування в системах, що складаються з агентів із бінарною опозицією (тобто приймають значення спіна “+” або “-”, як у моделі Ізінга, чи “вгору” – “вниз”, або ж “так” – “ні”), відрізняються своєю ‘силою’. Щоб дослідити взаємодію між змінними властивостями вузлів та взаємодіями між ними, ми розглянули модель на складній мережі, де і сила спіну, і розподіл ступенів регулюються степеневими законами. Ми показали, що в наближенні відпаленої мережі термодинамічні функції моделі є самоусередненими. Це дозволяє нам визначити провідні температурні та польові залежності термодинамічних функцій, їх критичну поведінку, а також логарифмічні поправки на межі поділу різних фаз. Так ми встановили, що конкуренція двох степеневих законів призводить до нових класів універсальності.

[1]. M. Krasnytska, B. Berche, Yu. Holovatch, R. Kenna. *J. Phys.Complex.*, **1**, 035008 (2020).

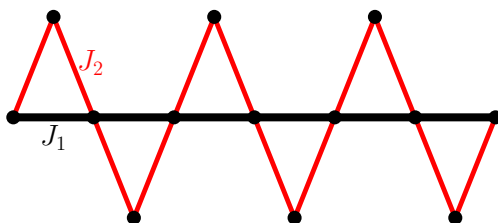
[2]. M. Krasnytska, B. Berche, Yu. Holovatch, R. Kenna. *Entropy*, **23(9)**, 1175 (2021).

Термодинамічні і динамічні властивості $S = 1/2$ моделі Гайзенберга на пілкоподібному ланцюжку

Т. Гутак

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна, E-mail: t.hutak@ictp.lviv.ua*

Розглянуто $S = 1/2$ магнетик Гайзенберга на пілкоподібному ланцюжку, див. рисунок. Залежно від відношення параметрів J_1/J_2 модель виявляє різноманіття квантових фаз, які приводять до незвичної термодинамічної поведінки [1,2]. Для обчислення термодинамічних і динамічних величин застосовано метод двочасових функцій Гріна зі збереженням ротаційної симетрії у спіновому просторі (наближення Кондо-Ямаджі [3]). Ці результати порівняно із даними точної діагоналізації для скінченних систем до 20 вузлів. Обчислений динамічний структурний фактор $S_q(\omega)$ може бути корисним при аналізі експериментів із розсіянням нейтронів на кристалі акатаміту, який при температурах $T > T_N \approx 9$ К відповідає системі слабковзаємодіючих $S = 1/2$ пілкоподібних ланцюжків Гайзенберга із значенням обмінних взаємодій $J_1 = 310$ К і $J_2 = 102$ К [4].



Дослідження виконані разом з О. Держком (ІФКС, Львів), Т. Крохмальським (ІФКС, Львів) і Й. Ріхтером (Університет Магдебурга).

[1] J. Richter, O. Derzhko, and A. Honecker, *Int. J. Mod. Phys. B*, **22**, 4418 (2008).

[2] J. Richter, J. Schulenburg, D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov, and J. Schnack, *Condensed Matter Physics*, **23**, 43710 (2020).

[3] J. Kondo and K. Yamaji, *Progress of Theoretical Physics*, **47**, 807 (1972).

[4] L. Heinze *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **126**, 207201 (2021).

Дослідження впливу пористого середовища на дифузію плин у твердих сфер.

М.Я. Корвацька, М.Ф. Головка

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: MariaMaria301181@gmail.com*

Узагальнюємо теорію Енскога для опису коефіцієнта самодифузії плин у твердих сфер в неупорядкованому пористому середовищі. Прості аналітичні вирази для контактних значень плин-плин та плин-матриця парних функцій розподілу отримуються та використовуються як вхідні теорії Енскога. Вирази, отримані для контактних значень, описуються лише геометричною пористістю і не включають залежність від інших типів пористості, важливих для опису термодинамічних властивостей. Показано, що застосування таких контактних значень нехтує ефектами захоплення частинок плин матрицею і, принаймні, термодинамічна пористість повинна бути включена в теорію Енскога. Розширюємо теорію Енскога, змінюючи контактні значення парних функцій розподілу плин-матриця та плин-плин новими властивостями, які включають залежність не тільки від геометричної пористості, але й від термодинамічної пористості. Показано, що таке напівемпіричне вдосконалення теорії Енскога відповідає наближенню SPT2b1 для опису термодинамічних властивостей і передбачає правильні тенденції впливу пористих середовищ на коефіцієнт дифузії плин у твердих сфер в неупорядкованому пористому середовищі. Проілюстровано добре узгодження з комп'ютерними моделюваннями. Теорія Енскога узагальнена для опису коефіцієнта самодифузії плинів плямистих колоїдів у неупорядкованих пористих середовищах. Запропоновані вирази для модифікованих контактних значень плин-плин і плин-матриця парних функцій розподілу включають три вклади: вклад твердих сфер; внесок від ефекту збіднення, пов'язаний з відштовхуванням кластер-кластер та кластер-матриця; та вклад, пов'язаний з внутрішньо-молекулярною кореляцією всередині кластера. Досліджено вплив розмірів та типів кластеризації.

[1] Holovko M.F., Korvatska M.Ya., *Condens. Matter Phys.*, 23(2), 23605 (2020). [doi:10.5488/CMP.23.23605](https://doi.org/10.5488/CMP.23.23605)

[2] Holovko M.F., Korvatska M.Ya., *Condens. Matter Phys.*, 24(3), 33605 (2021). [doi:10.5488/CMP.24.33605](https://doi.org/10.5488/CMP.24.33605)

Колективна динаміка в іонних рідинах: теорія і комп'ютерне моделювання

М. Копча, Т.М. Брик

Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна, E-mail: kopcha@ictp.lviv.ua

Першопринципна (*ab initio*) молекулярна динаміка є ефективним інструментом для дослідження динамічних властивостей іонних рідин, оскільки дозволяє прояснити роль процесів локального впорядкування внаслідок локальної електронейтральності на колективні збудження в рідині. Однак, проблемою *ab initio* молекулярної динаміки (АІМД) є практична неможливість розрахувати в рамках функціоналу густини просторові Фур'є-компоненти густини енергії, що потрібно для аналізу колективних мод в рамках термо-в'язкопружної моделі узагальнених колективних мод (УКМ).

У даній роботі для отримання спектрів колективних збуджень в бінарних розплавах з АІМД пропонується комбінація методу УКМ з підгонкою певних матричних елементів узагальненої гідродинамічної матриці $8 \times 8 \mathbf{T}(k)$. У запропонованій схемі підгонки, шість часових кореляційних функцій, отриманих з АІМД, 3 парціальні функції густина-густина та 3 парціальні функції потік-потік, відтворюються з використанням лише дев'яти параметрів підгонки (невідомих матричних елементів матриці $\mathbf{T}(k)$, пов'язаних з густиною енергії). Якість підгонки теоретичної моделі під АІМД-обраховані функції потік-потік та густина-густина перевірено на системі іонних розплавів NaCl і Al₂O₃. За допомогою такої схеми для розплаву NaCl розраховано спектри колективних збуджень, які вказують на наявність високочастотних колективних мод, які є аналогом оптичних фононів у іонних кристалах.

Кільцеві полімери на перколяційному кластері

Х. Гайдуківська, В. Блавацька

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна, E-mail: wja4eslaw@gmail.com*

В цій роботі ми досліджуємо кільцеві полімери в середовищі зі структурними неоднорідностями, як наприклад полімерний гель, використовуючи модель блукання без самоперетинів на тривимірному перколяційному кластері.

Дослідження проводились в рамках чисельного моделювання з використанням стрижневого алгоритму. Отримані оцінки для характеристик розміру та форми, вказують на зростання видовженості кільцевих полімерів в неупорядкованому середовищі у порівнянні з випадком чистого розчинника.

Ефекти середовища у термічній денатурації ДНК

Ю. Гончар^{a b c}, Ю.В. Головач^{a b c}, К. фон Фербер^{b c}

^a Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна, E-mail: julkohon@ictp.lviv.ua
^b Співпраця \mathbb{L}^4 і Коледж докторантів 'Статистична фізика складних систем', Ляйпциг-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа
^c Центр плинних і складних систем, Університет Ковентрі, Ковентрі, CV1 5FB, Великобританія

Якість розчинника, присутність витягнутих структур («зайняте» середовище) - це ефекти середовища, які можуть змінити рід переходу між денатурованим та зв'язаним станами ДНК і привести до змін законів скейлінгу для конформаційних властивостей ланцюжків ДНК. Досліджені нами ефекти значним чином впливають на інтенсивність переходу першого роду частки розупорядкованих вузлів на ланцюзі. Ми розглянули термічну денатурацію ДНК у підході моделі Поланда-Шераги і обчислили ентропійні показники денатурованих петель на ланцюгу методами теорії поля для полімерів. Для випадку $d = 2$ показники обчислено завдяки проектуванню полімерної моделі на двовимірну випадкову ґратку - подібно до систем з присутньою квантовою гравітацією. На вимірності $d = 3$ за допомогою прийомів пересумовування розбіжних степеневих рядів нами було проаналізовано відповідні показникам $\epsilon = 4 - d$ розклади. Ще одним розглянутим нами ефектом стала присутність у розчиннику протяжних непроникних областей, що посилюють інтенсивність переходу першого роду обмежуючи кількість можливих конфігурацій макромолекули.

Особливості поздовжньої колективної динаміки розплаву GaSb вздовж лінії плавлення: ab initio комп'ютерне моделювання

Т. Демчук^a, Т. Брик^{a,b}

^aІнститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна

^bНаціональний університет «Львівська політехніка»,
вул. Степана Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

За останні два десятиліття рівень розуміння фундаментальних фізичних механізмів динаміки рідких металів значно зріс. При цьому, даний напрямок не втрачає актуальності як для теоретичних, так і для експериментальних досліджень. На жаль, це стосується лише однокомпонентних систем. При дослідженні вже навіть двокомпонентних розплавів виникають труднощі з розумінням внесків різних динамічних процесів у загальну динамічну поведінку системи.

Дана робота присвячена дослідженню поздовжньої колективної динаміки розплаву GaSb вздовж лінії плавлення в діапазоні тисків 0–3,6 ГПа. З допомогою пакету прикладних програм VASP було проведено першопринципне комп'ютерне моделювання GaSb у трьох термодинамічних точках. На основі отриманої інформації про мікроскопічні параметри системи на кожному часовому кроці розраховані колективні змінні та відповідні кореляційні функції. Застосовано метод узагальнених колективних мод (GCM) для розділення внесків від різних колективних мод. Встановлено присутність чітко розділених акустичних та оптичних поздовжніх мод, а також присутність третьої негідродинамічної поздовжньої моди за високих значень хвильового числа. Встановлено, що частота поздовжніх оптичних мод зростає зі збільшенням тиску в системі.

Магнітна енергія і фактор форми еластомера з неоднорідно намагніченими частинками

Д. Яремчук^a, В. Тощевиков^b, Я.М. Ільницький^a, М. Сафьянникова^c

^aІнститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна, E-mail: yaremchuk@ictp.lviv.ua,
E-mail: iln@ictp.lviv.ua

^bRussian academy of sciences, Institute of macromolecular compounds, Bolshoy
pr. 31, 199004 Saint-Petersburg, Russia, E-mail: toshchevikov@imc.macro.ru

^cLeibniz Institute of Polymer Research, Hohe Str. 6, Dresden, Germany,
E-mail: grenzer@ipfdd.de

Полімерні матеріали з яскраво вираженими еластичними властивостями називають еластомерами. Податливість приготування, нейтральність (електро, магніто, біо), еластичність, роблять еластомери перспективними компонентами в проектуванні нових композитних матеріалів. Магнето-активні композитні матеріали на основі еластомерів (магніточутливі еластомери, MSE) можуть змінювати свої еластичні властивості під дією зовнішнього магнітного поля. MSE застосовні в областях від індустрії до медицини. Стандартний підхід у теоретичному описі магнітної підсистеми MSE є представлення магнітних взаємодій через точкові диполі. Проте для частинок на відстанях, що пропорційні їх радіусам, важливу роль починають відігравати ефекти неоднорідного об'ємного намагнічення. Зокрема, це може приводити до підсилення здатності частинок агрегувати.

В даній роботі ми розвинули просту модель самоузгоджених диполів (SCD), що дозволяє врахувати неоднорідне намагнічення частинок і передбачити підсилення агрегаційних властивостей, порівняно з точковими диполями. Також провели порівняння різних потенціалів, що враховують ефекти неоднорідного намагнічення, зокрема потенціал отриманий з розв'язку рівняння Лапласа (LE). Ми перевірили, що фактор форми отриманий з потенціалу виведеного через розв'язок LE узгоджується з результатом для точкового диполя і теорією суцільного середовища. Також ми провели якісний аналіз впливу розподілу частинок в еластомері на ефекти магнітострикції.

Дослідження багатокубітних графових станів на квантовому комп'ютері компанії IBM

Н.А. Сусуловська^{a,b}, Х.П. Гнатенко^{a,b}

^a Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет, кафедра теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна,
E-mail: n.a.susulovska@gmail.com

^b SoftServe Inc., Austin, TX, USA

Заплутаність виступає ключовим ресурсом у квантовій інформації та квантових комунікаціях. Актуальними є дослідження квантових графових станів, які широко використовуються у квантовій криптографії, квантових алгоритмах корекції помилок [1]. Ми досліджуємо багатокубітні графові стани, утворені дією операторів контрольованого зсуву фази на стан системи, у якому всі кубіти перебувають в однакових довільних станах [2]. Знайдено геометричну міру заплутаності [3] кубіта з іншими кубітами у таких графових станах. Ми показали, що ця величина залежить від ступеня вузла, що відповідає кубіту у відповідному графі [4]. Також розраховано геометричну міру заплутаності графових станів на квантовому комп'ютері компанії IBM. Зокрема, розглянуто стани, які відповідають ланцюжку, зірці та повному графу [5]. Результати, отримані за допомогою квантових обчислень, добре узгоджуються з теоретичними.

[1] Y. Wang, Y. Li, Zh. Yin and B. Zeng, *npj Quantum Inf.*, 4, 46 (2018).

[2] Kh.P. Gnatenko, N.A. Susulovska, [arXiv:2106.10688v1](https://arxiv.org/abs/2106.10688v1)

[3] A.M. Frydryszak, M.I. Samar, V.M. Tkachuk, *Eur. Phys. J.*, 71, 233 (2017).

[4] Kh.P. Gnatenko, V.M. Tkachuk. *Phys. Lett A*, 396, 127248 (2021).

[5] IBM Quantum. <https://quantum-computing.ibm.com/> (2021).

Міри заплутаності та змішаності квантових станів фрустрованого октаедричного ланцюжка Гайзенберга

О. Крупніцька

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна, E-mail: krupnitska@ictp.lviv.ua*

Розглядається спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітна модель Гайзенберга фрустрованого октаедричного ланцюжка в магнітному полі. В попередньому дослідженні [1] було показано, що теорія локалізованих магнінів [2] може бути модифікована для простого розрахунку міри двоспінової заплутаності на квадратах в спін- $\frac{1}{2}$ октаедричному ланцюжку Гайзенберга - узгодженості [3]. Дана робота спрямована на продовження вивчення застосування теорії локалізованих магнінів для знаходження інших мір двоспінової заплутаності в спін- $\frac{1}{2}$ октаедричному ланцюжку Гайзенберга, а також на знаходження мір змішаності [4] квантових станів октаедричного ланцюжка. Зокрема, розглянемо такі міри заплутаності як заплутаність формування і негативність, а в якості мір змішаності - лінійну ентропію та ентропію фон Ноймана. Результати даного дослідження свідчать про нові можливості застосування теорії локалізованих магнінів для простого обчислення мір заплутаності та змішаності квантових станів плоскозонних антиферромагнетиків Гайзенберга.

[1] J. Strečka, O. Krupnitska and J. Richter, EPL, **132** 30004 (2020).

[2] J. Schulenburg et al., Phys. Rev. Lett., **88**, 167207 (2002).

[3] L. Amico et al., Rev. Mod. Phys., **80**, 517 (2008).

[4] T. C. Wei, K. Nemoto, P. M. Goldbart, P. G. Kwiat, W. J. Munro and F. Verstraete, Phys. Rev. A, **67**, 022110 (2003).

Визначення геометричної міри заплутаності спінових систем з взаємодією Гайзенберга на квантовому комп'ютері компанії IBM

С. Тимик

*Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет, кафедра теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука, вул. Драгоманова, 12, 79005 Львів, Україна,
E-mail: xsvtsx@gmail.com*

У роботі досліджено стани, породжені оператором еволюції з гамільтоніаном Гайзенберга. Отримано вектор стану, який описує еволюцію цієї системи з часом, а також аналітичний вираз для геометричної міри заплутаності спіна з іншими спінами системи. Оператор еволюції реалізовано з використанням квантових кубічних елементів на квантовому комп'ютері компанії IBM. Проведено вимір середніх значень спіна на квантовому комп'ютері та знайдено геометричну міру заплутаності. Результати, отримані для геометричної міри заплутаності на квантовому комп'ютері, добре узгоджуються з теоретичними розрахунками.

Авторський покажчик

Блавацька В., 22
Брик Т.М., 21, 24
Гайдуківська Х., 22
Гнатенко Х.П., 26
Головач Ю.В., 18, 23
Головко М.Ф., 20
Гончар Ю., 23
Гутак Т., 19
Демчук Т., 24
Добуш О.А., 17
Ільницький Я.М., 25
Козловський М.П., 17
Копча М., 21
Корвацька М.Я., 20
Красницька М., 18
Крупницька О., 27
Сафьянникова М., 25
Сахнюк В.Є., 13
Сусуловська Н.А., 26
Тимик С., 28
Тощевиков В., 25
фон Фербер К., 23
Шаповал Д., 14
Шутовський А., 13
Яремчук Д., 25

Для нотаток

XXI Всеукраїнська школа-семінар
та Конкурс молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2021
Львів, 11–12 жовтня 2021 р.

Збірка тез

© Інститут фізики конденсованих систем НАН України
Львів, 2021

Комп'ютерне макетування: Андрій Швайка

Укладання: Данило Добушовський

Графічний дизайн: Петро Сарканич

Підтримка:

