

Львів, 24-25 жовтня 2024

**24-та Всеукраїнська
школа-семінар
молодих вчених**

**зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини**

Збірка тез



**Інститут фізики конденсованих систем
НАН України**

**XXIV Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2024**

**Львів, 24–25 жовтня 2024 р.
Інститут фізики конденсованих систем НАН України**

ПРОГРАМА ТА ТЕЗИ

Львів — 2024

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.

В програмі:

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

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

Різноманітна культурно-розважальна частина сприятиме особистому знайомству з колегами по фаху і можливості ширших критичних дискусій: окрім наукових лекцій та доповідей учасники Школи-семинару матимуть чудову нагоду відчутися 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 семінару — 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://icmp.lviv.ua/konkurs/>

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

**XXIV Всеукраїнська школа-семинар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2024**

Програма

Львів, 24–25 жовтня 2024 р.

Четвер, 24 жовтня 2024 р.

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

Засідання I

Головує Т.М. БРИК

09:10 – 10:10 Запрошена лекція
ЯРОСЛАВ ОЛЕКСАНДРОВИЧ ЗОЛОТАРЮК
Симетрійний підхід до проблеми направленого руху частинок та солітонів
ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ

10:10 – 10:25 ОЛЬГА БАГРОВА
Формалізм випадкових блукань для опису ефекту храповика в фотонному аналізі графена
Institut Pascal, Aubière, France
Institute for Basic Science, Daejeon, Korea
ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків

10:25 – 10:40 ПЕТРО САРКАНИЧ
Effect of network topology on collective decision making
ІФКС НАН України, Львів
 \mathbb{L}^4 Collaboration & Doctoral College, Europe

10:40 – 10:55 ЮЛІЯ ГОРБАТЕНКО
Особливості температурних залежностей теплопровідності композитних матеріалів та їх аналіз: правило Меєра-Нельдела
ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків

10:55 – 11:10 ОКСАНА ДОБУШ
Термодинамічні функції відгуку коміркової моделі плинну
ІФКС НАН України, Львів

11:10 – 11:30 Перерва

Четвер, 24 жовтня 2024 р.

Засідання II

Головує А.Д. Трохимчук

- 11:30 – 12:30 Запрошена лекція
ВІКТОР МИХАЙЛОВИЧ ПЕРГАМЕНЩИК
Короткий огляд сучасних досліджень ультрахолодних
бозе газів
СТР PAS, Warsaw, Poland
- 12:30 – 12:45 Владислав УНУКОВИЧ
**Ультрахолодні чотирикомпонентні фермі-гази в
оптичних ґратках. Вплив порушення просторової та
спінової симетрій на фізичні властивості**
ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків
ІНЦ ХФТІ, ІТФ ім. О.І. Ахієзера НАН України, Харків
- 12:45 – 13:00 Дмитро ШАПОВАЛ
**Критична поведінка структурно неупорядкованих
магнетиків з далекосяжною взаємодією**
ІФКС НАН України, Львів
L⁴ Collaboration & Doctoral College, Europe
- 13:00 – 13:15 Семен Кононенко
**Низькотемпературна термодинаміка анізотропної
декорованої спінової драбини**
ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків
- 13:15 – 13:30 Арсен Герасимчук
**Особливості колапсу рівнів Ландау в графенових
нанострічках у схрещених магнітному та площинному
електричному полях**
ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
- 13:30 – 14:30 Обідня перерва

Четвер, 24 жовтня 2024 р.

Засідання III

Головує Т.М. Верхоляк

- 14:30 – 15:30 Запрошена лекція
ІГОР ІВАНОВИЧ ШТАБЛАВИЙ
Структура неупорядкованих систем: основи експериментальних досліджень
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 15:30 – 15:45 ЄВГЕН ЛІМАРЕВ
Метод обробки ARPES спектрів на основі U-Net
КНУ ім. Т. Шевченка, Київ
- 15:45 – 16:00 МАРІЯ КОПЧА
Дослідження поперечних колективних збуджень в бінарних рідинах з різним співвідношенням мас компонент
ІФКС НАН України, Львів
- 16:00 – 16:20 Перерва

Четвер, 24 жовтня 2024 р.

Засідання IV

Головує Т.М. Пацаган

- 16:20 – 16:35 ТАРАС ДЕМЧУК
Особливості структури розплаву Li вздовж ізотерми 600К: ab initio комп'ютерне моделювання
ІФКС НАН України, Львів
- 16:35 – 16:50 ОЛЕГ ЄРМАКОВ
Оптимізація дизайну метаповерхонь для різноманітних застосувань
ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків
- 16:50 – 17:05 Ілля-Микола Іленков
Особливості динамічних характеристик водневого флюїду з наявною дисоціацією та асоціацією
ІФКС НАН України, Львів
- 17:05 – 17:20 АРТЕМ ГРІНЧЕНКО
Інженерія плазмонних анізотропних метаповерхонь на основі золотих нанопластин
ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків

П'ятниця, 25 жовтня 2024 р.

Засідання V

Головує О.В. ДЕРЖКО

- 09:00 – 10:00 Запрошена лекція
ТАРАС МИХАЙЛОВИЧ ВЕРХОЛЯК
Двовимірний фрустрований магнетизм на прикладі
моделі Шастри-Сазерленда і сполуки $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$
ІФКС НАН України, Львів
- 10:00 – 10:15 Анна КАБАТОВА
**Енергетичний спектр та низькотемпературні
властивості спінової моделі, побудованої зі скінченних
XX ланцюжків, зв'язаних в «сніп» ізінгівськими
спінами**
ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків
- 10:15 – 10:30 Максим ПАРИМУДА
**Термодинаміка Гайзенбергового феромагнетика зі
спіном 1/2 на гратці гіперкагоме**
ІФКС НАН України, Львів
- 10:30 – 10:45 Ольга МАЗУР
**Stochastic theory of domain structure formation in
uniaxial ferroelectrics**
Technical University of Liberec, Liberec, Czech Republic
- 10:45 – 11:00 Тарас ГУТАК
**Термодинаміка $S = 1/2$ антиферомагнетика
Гайзенберга на гратці «кленовий лист»**
ІФКС НАН України, Львів
- 11:00 – 11:20 Перерва

П'ятниця, 25 жовтня 2024 р.

Засідання VI

Головує Я.М. Ільницький

- 11:20 – 12:20 Запрошена лекція
БОГДАН ІВАНОВИЧ ЛЕВ
Active colloids
ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
- 12:20 – 12:35 ГАЛИНА БУТОВИЧ
ЕДТА при різних рівнях протонації для хелатування іонів ртуті у водному розчині
ІФКС НАН України, Львів
Lappeenranta-Lahti University of Technology, Lappeenranta, Finland
- 12:35 – 12:50 ДМИТРО ЯРЕМЧУК
Геометричні ефекти на функціональній поверхні
ІФКС НАН України, Львів
- 12:50 – 13:05 ОЛЕГ ДЕМ'ЯНИК
Підсилення кірального детектування за допомогою плазмонних структурованих метаповерхонь
ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків
- 13:05 – 13:20 ЮЛІАН ГОНЧАР
Ефективна критична поведінка в моделі Блюме-Капля на повному графі
ІФКС НАН України, Львів
L⁴ Collaboration & Doctoral College, Europe
- 13:20 – 14:30 Обідня перерва. Засідання комісії
- 14:30 – 15:00 Підбиття підсумків. Нагородження переможців.

**XXIV Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2024**

Доповіді школи-семінару

Львів, 24–25 жовтня 2024 р.

Формалізм випадкових блукань для опису ефекту храповика в фотонному аналозі графена

О.М. Багрова ^{a,b,c}, С.В. Коняхін ^b

^aІнститут Паскаль, пр-т. Б. Паскаль, 4, Об'єр, Франція

E-mail: olha@ibs.re.kr

^bЦентр теоретичної фізики складних систем, Інститут

фундаментальних наук, Експо-ро, 55, 34126 Теджон, Республіка Корея

^cФізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України, пр-т Науки, 47, 61103 Харків, Україна

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

В даній роботі [1] ми розглядаємо поляритонний аналог графену за наявності включеного дефекту у вигляді трикутника з вирізаних сайтів решітки. Для того, щоб дослідити часову еволюцію хвильового пакета, ми виконали чисельне моделювання з використанням рівняння Гросса-Пітаєвського. Отримано ефективні перерізи розсіяння та індикатриси для хвильового пакета з певний хвильовим вектором після розсіяння його на трикутному дефекті в класичному та хвильовому режимах. На основі отриманих результатів щодо асиметричного розсіяння запропоновано схему спостереження на його основі ефекту храповика. А саме, декілька трикутних дефектів було вбудовано в решітку типу соти та розраховано інтенсивність за межами даної області. До того ж, ми використали підхід кінетичного рівняння Больцмана у досить простому наближенні в рамках випадкових блукань. Як результат, ми отримали змогу прокласти місток між глобальним для системи ефектом храповика та отриманими ефективними перерізами розсіяння.

[1] O.M. Bahrova, S.V. Koniakhin, Skew scattering and ratchet effect in photonic graphene, [arXiv:2406.03132](https://arxiv.org/abs/2406.03132) (2024).

Effect of network topology on collective decision making

P. Sarkanych^{a,b}, Y. Sevinchan^{c,d}, Yu. Holovatch^{a,b,e,f}, P. Romanczuk^{c,d}

^a*Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, Ukraine*

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

^c*Institute for Theoretical Biology, Department of Biology, Humboldt Universität zu Berlin, Berlin, Germany*

^d*Research Cluster of Excellence 'Science of Intelligence', Berlin, Germany*

^e*Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry, UK*

^f*Complexity Science Hub Vienna, Vienna, Austria*

The effect of prior information and biases on collective decision making has become a popular research topic in recent years. In 2018 Hartnett *et.al.* proposed a model that takes into account heterogeneous preferences of individuals, i.e. biases. However, the effect these biases have on the decision making was only analysed in the case of lattice topology and complete graph. On the other hand, social structures often have a topology of a random network. In this paper, we aim to investigate how network topology affects collective decision making in cases when each individual has bias.

Особливості температурних залежностей теплопровідності композитних матеріалів та їх аналіз: правило Меєра-Нельдела

Ю.В. Горбатенко, О.О. Корольок, О.О. Романцова, О.І. Кривчіков

*Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України, пр-т Науки, 47, 61103 Харків, Україна,
E-mail: horbatenko@ilt.kharkov.ua*

Проведено аналіз температурних залежностей теплопровідності $\kappa(T)$ композитних матеріалів – графен-багатошаровий графен, напівпровідникових композитів $Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te_3$ та $In_{0.53}Ga_{0.47}As$, а також співставлення їх температурних залежностей теплопровідності з теплопровідністю подібних матеріалів, які сформовані у вигляді надґраток, нанодротів та гібридних наноструктур. Температурні залежності теплопровідності $\kappa(T)$ цих матеріалів можуть бути описані у вигляді суми двох внесків – квазі-частинкового κ_p та когерентного κ_c :

$$\kappa = \kappa_p + \kappa_c, \quad (1)$$

що відповідає двом основним механізмам теплопереносу [1].

У випадку орієнтаційно-впорядкованих кристалів теплопровідність, як правило, може бути представлена у вигляді:

$$\kappa = AT^{-1} + \kappa_0, \quad (2)$$

де перший доданок зумовлений трьохфононними процесами розсіяння квазічастинок (фононів), а другий доданок пов'язаний з хвильовими властивостями фононів та їх здатністю тунелювати між фононними смугами, що відповідають акустичним та оптичним фононним гілкам в реальному законі дисперсії [1]. В речовинах, де присутній дальній порядок, величина когерентного внеску κ_p зазвичай мала, порівняно з квазічастинковим κ_p , проте вона стає суттєвою, коли трансляційний порядок відсутній – тоді має місце т.зв. склоподібна поведінка теплопровідності, яка може бути представлена у вигляді експоненціальної залежності типу Арреніуса:

$$\kappa_c = \kappa_0 \exp(-E/T) \quad (3)$$

з двома характеристичними параметрами: передекспоненціальним множителем κ_0 та енергією E .

Було встановлено, що температурні залежності теплопровідності зі склоподібною поведінкою досить добре описуються за допомогою виразу (3). Показано, що величина передекспоненціального множника κ_0 лінійно залежить від енергії E . Такий взаємозв'язок між величинами (передекспоненціальним множником та енергією) раніше був виявлений в електропровідності напівпровідників (правило Меєра-Нельдела) [2, 3].

Робота виконана за підтримки Національного фонду України (проект № 2023.03/0012).

- [1] A.I. Krivchikov, Y.V. Horbatenko, O.A. Korolyuk, O.O. Romantsova, O.O. Kryvchikov, D. Szewczyk & A. Jezowski, [Materialia](#), **32**, 101944 (2023).
- [2] A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, [Low Temperature Physics](#), **50**(4), 328-341 (2024).
- [3] W.V. Meyer and H. Neldel, *Z. tech. Phys.*, **18**(12), 588–593 (1937).

Термодинамічні функції відгуку коміркової моделі плинну

О.А. Добуш, М.П. Козловський, Р.В. Романік, І.В. Пилюк

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

Ми розрахували термодинамічні функції відгуку: ізотермічну стисливість κ_T , термічний коефіцієнт тиску β_V , та коефіцієнт теплового розширення α_P , для системи частинок, які взаємодіють через модифікований потенціал Морзе [1]. Ці розрахунки проводились, виходячи з рівняння стану, отриманого в попередній роботі для коміркової моделі плинну в формалізмі великого канонічного ансамблю [2]. Досліджено залежність отриманих величин від густини і ефективного хімічного потенціалу в широкій області густин і температур вище критичної точки. Зокрема, показано, що ізотермічна стисливість та коефіцієнт теплового розширення проявляють максимуми із наближенням до критичної точки. Натомість термічний коефіцієнт тиску є монотонно зростаючою функцією густини (або хімічного потенціалу, залежно від обраних змінних), а його залежність від температури є дуже слабкою. Термодинамічну тотожність $\frac{\alpha_P}{\kappa_T \beta_V} = 1$ перевірено для підтвердження самоузгодженості виконаних розрахунків.

Роботу виконано за підтримки Національного фонду досліджень України в рамках проекту No. 2023.03/0201.

- [1] Dobush O.A., Kozlovskii M.P., Romanik R.V., Pylyuk I.V., [arXiv:2409.09786](https://arxiv.org/abs/2409.09786) (2024).
- [2] Kozlovskii M.P., Dobush O.A., [Ukr. J. Phys. 65, 428 \(2020\)](#).

Ультрахолодні чотирикомпонентні фермі-гази в оптичних ґратках. Вплив порушення просторової та спінової симетрій на фізичні властивості

В.І. Унукович^{a,b}, А.Г. Сотніков^{a,b}

^a*Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, майдан
Свободи, 4, 61022 Харків, Україна*

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

Одним з наріжних каменів для поглибленого дослідження квантових систем багатьох тіл стала експериментальна реалізація оптичних ґраток для нейтральних атомів. Оптична ґратка являє собою просторово-періодичний потенціал, що утворений ортогонально орієнтованими відносно один одного когерентними лазерними променями. У цьому потенціалі можна ефективно захоплювати атомні гази. Така система аналогічна до структури ґраток твердотілих кристалів, де замість електронів використовують атоми лужних та лужноземельних металів. Це не тільки дає змогу вивчати властивості кристалів, але й властивості систем з високими спіновими симетріями.

У цій доповіді ми наводимо результати з дослідження впливу порушення просторової симетрії кубічної оптичної ґратки та спінової симетрії гамільтоніану на фізичні властивості та впорядкування фермі-газу з чотирма спіновими компонентами. У якості теоретичної моделі використано узагальнену модель Фермі-Габбарда, де частинки локально взаємодіють на вузлах ґратки та тунелюють між найближчими вузлами, та метод динамічної теорії середнього поля (DMFT) для отримання фізичних параметрів за допомогою чисельних розрахунків. У випадку порушення просторової симетрії ґратки розглянуто анізотропну кубічну ґратку, де амплітуда тунелювання тільки вздовж однієї з кристалографічних осей відрізняється від інших, та досліджено можливі антиферромагнітні фази у рамках підходу DMFT. Також проаналізовано окремі випадки явного порушення $SU(4)$ симетрії, для яких виведено ефективні моделі в границі сильного зв'язку з отриманням відповідних енергетичних спектрів і розподілів спінових компонентів у гармонічній пастці.

Критична поведінка структурно неупорядкованих магнетиків з далекосяжною взаємодією

Д. Шаповал^{a,b}, М. Дудка^{a,b,c}, Ю. Головач^{a,b,d,e}

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

^bСпівпраця \mathbb{L}^4 & Докторський коледж із статистичної фізики складних систем, Ляйпціг-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа

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

^dЦентр дослідження плинних і складних систем, Університет Ковентрі, Ковентрі, CV15FB, Великобританія

^eЦентр науки про складність, Відень, 1080, Австрія

Метою нашого дослідження є аналіз змін критичної поведінки магнітної системи під впливом конкуренції двох факторів: слабкої далекосяжної взаємодії та слабого структурного безладу [1]. Зокрема, ми досліджуємо феромагнітне впорядкування у структурно неупорядкованому магнетикі в рамках n -векторної моделі в d -вимірному просторі, де далекосяжна взаємодія спадає з відстанню x як $J(x) \sim x^{-d-\sigma}$, де σ – контролюючий параметр [2]. Для ідентифікації класів універсальності досліджуваної системи та визначення універсальних характеристик критичної поведінки ми працюємо в рамках теоретико-польової ренормалізаційної групи (РГ) [3]. Наші результати демонструють, що існує область параметрів (d, n, σ) , коли далекосяжна взаємодія та структурний безлад призводять до появи нового “випадкового далекосяжного” класу універсальності. Використовуючи підхід при фіксованій просторовій вимірності $d = 3$, ми знаходимо значення критичного показника кореляційної довжини ν , що характеризує цей клас, із пертурбативних РГ-функцій.

Дослідження виконане за підтримки проєкту 2023.03/0099 “Критичність складних систем: фундаментальні аспекти та застосування” від НФДУ.

- [1] М. Дудка, Д. Шаповал, Ю. Головач, *Журнал фізичних досліджень* **28** (2), 2601 (2024).
- [2] Y. Yamazaki, *Physica A* **90** (1978) 547; D. Benedetti, R. Gurau, S. Harribey, K. Suzuki, *J. Phys. A: Math. Theor.* **53**, 445008 (2020).
- [3] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, World Scientific, Singapore (1989).

Низькотемпературна термодинаміка анізотропної декорованої спінової драбини

С. Кононенко, О.В. Єзерська

Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, фізичний факультет, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна,
E-mail: semen.kononenko@student.karazin.ua

Проведені теоретичні дослідження особливостей енергетичного спектру та низькотемпературної поведінки основних термодинамічних характеристик декорованої спінової драбини, яка складається із трицентрових фрагментів із XXZ взаємодією, зв'язаних у циліндр через додаткові ізінгівські спіни (всі спіни $s = 1/2$), з гамільтоніаном

$$\hat{H} = - \sum_{l=1}^L \left[g_1 \mu_B H \sigma_{l,1}^z + J_1 (\sigma_{l,1}^z + \sigma_{l+1,1}^z) S_{l,1}^z + \right. \\ \left. + g_3 \mu_B H \sigma_{l,3}^z + J_3 (\sigma_{l,3}^z + \sigma_{l+1,3}^z) S_{l,3}^z + \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^3 g \mu_B H S_{l,n}^z + J \sum_{n=1}^2 (S_{l,n}^x S_{l,n+1}^x + S_{l,n}^y S_{l,n+1}^y + \gamma S_{l,n}^z S_{l,n+1}^z) \right]$$

Запропонована модель має топологію реально існуючих біметалічних магнетиків.

Застосований метод трансфер-матриці, який враховує, що власні значення $\sigma_{l,1}^z, \sigma_{l,3}^z, l = 1, 2, \dots, L$ є квантовими числами для досліджуваного гамільтоніану.

Вивчались польові та температурні залежності намагніченості, магнітної сприйнятливості та теплоємності, польові залежності середніх значень ізінгівських декоруючих спінів та парні кореляційні функції для найближчих сусідніх декоруючих спінів. Для випадку великих значень g -фактору у трицентрових сегментах та антиферромагнітної ізінгівської взаємодії прості аналітичні розрахунки свідчать про те, що корелятори $\langle \sigma_{l,1}^z \sigma_{l+1,1}^z \rangle$ та $\langle \sigma_{l,3}^z \sigma_{l+1,3}^z \rangle$ дорівнюють нулю в полі $g_1 \mu_B H = J_1$ та $g_3 \mu_B H = J_3$ відповідно. Така поведінка пов'язана з додатковим виродженням спінових конфігурацій.

Автори висловлюють подяку IEEE via "Magnetism in Ukraine Initiative" (STCU project No. 9918) за підтримку.

Особливості колапсу рівнів Ландау в графенових нанострічках у схрещених магнітному та площинному електричному полях

А.А. Герасимчук^a, С.Г. Шарапов^{a,b}, В.П. Гусинін^a

^aІнститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-б, 03143 Київ, Україна

^bКиївський академічний університет, бул. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна

Використовуючи ефективну низькоенергетичну теорію, досліджено вище колапсу рівнів Ландау у графенових нанострічках скінченної ширини та напівнескінченної геометрії, підданих перпендикулярному магнітному полю та площинному електричному полю, прикладеному перпендикулярно до зигзагоподібних і кріслоподібних країв.

Показано, що в напівнескінченній геометрії дірково(електронно)-подібні рівні Ландау колапсують, коли відношення електричного та магнітного полів досягає критичного значення $+(-)1$.

Енергії електронно(дірково)-подібних рівнів залишаються відмінними біля краю та всередині зразка, асимптотично наближаючись одна до одної для того самого критичного значення. У скінченній геометрії показано, що електронно(дірково)-подібні рівні стають щільнішими та зливаються, утворюючи зону. Показано, що поверхнева мода, що локалізована на краю, залишається бездисперсійною і при ненульовому електричному полі.

- [1] А.А. Herasymchuk, S.G. Sharapov, V.P. Gusynin, [Phys. Status Solidi RRL 17, 2300084 \(2023\)](#).
- [2] А.А. Herasymchuk, S.G. Sharapov, V.P. Gusynin, [Phys. Rev. B 110, 125403 \(2024\)](#).

Метод обробки ARPES спектрів на основі U-Net

Є.Д. Лімарев, Ю.В. Пустовіт

Київський національний університет ім. Т. Шевченка, факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем, пр-т. Академіка Глушкова, 4г, 03187 Київ, Україна, E-mail: applied.physicist@knu.ua

Запропоновано розглядати задачу визначення електронної дисперсії з ARPES спектрів як задачу семантичної сегментації (віднесення кожного пікселя зображення до певного класу) [1]. При цьому кожен піксель ARPES-спектра міг бути віднесений до одного з двох класів - піксель, що належить електронній дисперсії, або "фоновий". Для розв'язання цієї задачі використовувалась натренована на згенерованому наборі даних U-Net мережа з механізмом уваги. При тренуванні мережі у якості вхідних зображень використовувались згенеровані спектри, отримані, використовуючи формулу:

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\alpha \omega^2 + \text{imp}}{(\omega - mk^2 + l + \lambda \omega)^2 + (\alpha \omega^2 + \text{imp})^2}$$

при цьому значення параметрів змінювались відповідно у межах: λ (2.1 - 8), m (1 - 20), l (-0.3 - 1.3), α (0.1 - 5), imp (0 - 1). У якості бажаного виходу зображення, де пікселі мають значення 1 (піксель дисперсії) або 0 ("фоновий" піксель). Для оцінки відмінностей передбачення мережі та бажаного результату використовувалась функція втрат Binary Focal Loss [2].

Нейромережа використовувалась для визначення дисперсії з експериментально отриманих спектрів залізовмісних Fe(Se, Te) (різні поляризації випромінювання та діапазон температур 4 - 250 K) та мідних YBCO (різні поляризації випромінювання) надпровідників. Встановлено, що метод ефективно визначає дисперсію як у випадках схожих на тренувальні дані Fe(Se, Te), так і для тих, які суттєво відрізняються (YBCO), що свідчить про здатність нейромережі до узагальнення. Суттєвою перевагою методу, порівняно з іншими, є відсутність потреби у попередньому знешумленні спектрів та більша стійкість до шумів.

[1] Jonathan A. Sobota, et al., *Rev. Mod. Phys.* **93**, 025006 (2021).

[2] Tsung-Yi Lin, Priya Goyal, Ross Girshick, Kaiming He, Piotr Dollár. Focal Loss for Dense Object Detection. [arXiv:1708.02002](https://arxiv.org/abs/1708.02002) (2017).

Дослідження поперечних колективних збуджень в бінарних рідинах з різним співвідношенням мас компонент

М. Копча, І. Їдак, Т. Брик

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

Аналіз поперечних колективних збуджень у бінарних рідинах є важливим для розуміння їх динамічних властивостей, зокрема з різним співвідношенням мас компонентів. Дослідження зсувних хвиль у таких системах має важливе значення для застосувань у матеріалознавстві та фізиці рідин, оскільки поведінка цих хвиль впливає на теплофізичні властивості рідин.

У даній роботі проведено дослідження двох бінарних рідин з потенціалом Леннарда-Джонса: модель Коба-Андерсена 80-20 і еквімолярна суміш KrAr (50-50), з 4 співвідношеннями мас компонент (від 1 до 20). Для отримання спектрів поперечних збуджень використано комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки. За результатами моделювання для досліджуваних бінарних систем отримано дві гілки поперечних колективних збуджень – поперечних оптичних мод і зсувних хвиль. Встановлено, що зі збільшенням співвідношення мас компонентів зростає різниця між частотами зсувних хвиль і поперечних оптичних мод. Крім того, ширина щілини поширення зсувних хвиль зростає зі збільшенням співвідношення мас компонентів. Для великих значень співвідношення мас низькочастотна гілка зсувних хвиль практично зникає з частотного спектру. Аналітичні розрахунки підтвердили результати моделювання і показали необхідність врахування крос-кореляцій для точного опису поведінки зсувних хвиль у бінарних рідинах.

Особливості структури розплаву Li вздовж ізотерми 600К: *ab initio* комп'ютерне моделювання

Т. Демчук^a, Т. Брик^{a,b}

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

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

Структура рідини характеризується ближнім порядком, при цьому, присутність процесів переносу ускладнює дослідження структурних характеристик рідин. Проте, активне вивчення впливу високих тисків на структурні властивості рідин протягом останніх десятиліть дозволило встановити присутність фазових переходів типу "рідина-рідина" у різноманітних системах. Так, нещодавне дослідження розплаву Li методом багатокуткової дифракції рентгенівського випромінювання демонструє присутність нерівномірної зміни структурних характеристик при збільшенні тиску від 7,5 до 8,7 ГПа вздовж ізотерми 600К [1]. Виявлена зміна структури при збільшенні тиску у рідкому Li корелює зі зміною структури у кристалічному Li (перехід з bcc до fcc фази в околі 9 ГПа).

Використання методу дифракції рентгенівського випромінювання для дослідження структури рідин дозволяє розрахувати лише статичний структурний фактор системи. На противагу цьому, використання методів комп'ютерного моделювання дозволяє детально дослідити локальні та макроскопічні структурні характеристики системи. Дана робота демонструє результати дослідження розплаву Li у діапазоні тисків 2,0–11,0 ГПа вздовж ізотерми 600К з використанням *ab initio* молекулярної динаміки. Систему з 300 частинок було розраховано в рамках теорії функціоналу густини в шести термодинамічних точках. Розраховані статичні структурні фактори добре узгоджуються з отриманими експериментально. На відміну від результатів експерименту, зміна макроскопічних структурних параметрів з тиском не проявляє ознак структурних переходів. Проте, детальний розгляд зміни розподілу координаційного числа від тиску вказує на можливе перевпорядкування локальної структури у розплаві Li при збільшенні тиску з 6,5 до 8,0 ГПа.

[1] Shu, Y. et. al., *J. Phys. Chem. B* **124**, 7258–7262 (2020).

Оптимізація дизайну метаповерхонь для різноманітних застосувань

О. Єрмаков

*Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, майдан
Свободи, 4, 61022 Харків, Україна, E-mail: oe.yermakov@gmail.com*

Двовимірні (2D) матеріали відкривають унікальні можливості для випромінювання світла, збору енергії та посилення взаємодії світла з речовиною. Ще більший інтерес викликають штучно створені 2D мікро- і наноструктури, що прокладають шлях до безлічі застосувань і пристроїв, включаючи лінзування, голографію, поляриметрію, біодетектування, тощо. Стрімкий розвиток використання 2D наноструктур ставить нові виклики, зокрема в задачах пошуку оптимального дизайну для конкретних задач та застосувань. У цій роботі зосереджено увагу на метаповерхнях, що представляють собою періодичні масиви розсіювачів субхвильового діапазону.

Розроблено нові підходи, узагальнення та алгоритми інженерії метаповерхонь на основі напіваналітичних методів, чисельного моделювання та оберненого дизайну на основі методів машинного навчання [1]. Досліджено властивості плазмонних і діелектричних метаповерхонь та їхні застосування для (i) зміщення кута Брюстера [2], (ii) антивідбивних покриттів сонячних елементів, (iii) ультрафокусованої передачі локалізованого сигналу в площині [3], (iv) планарного хвилеводного поляризатора, (v) ефективного збору світла в оптоволокну [4]. Результати роботи демонструють посилення або модифікацію згаданих явищ за допомогою специфічного дизайну метаповерхні та показують зв'язок між властивостями та дизайном метаповерхні.

- [1] A. Hrinchenko, O. Yermakov, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **56**, 465105 (2023).
- [2] O. Yermakov, *Phys. Rev. A* **109**, L031502 (2024).
- [3] A. Hrinchenko, S. Polevoy, O. Demianyk, O. Yermakov, *J. Appl. Phys.* **135**, 223102 (2024).
- [4] O. Yermakov, M. Zeisberger, H. Schneidewind, J. Kim, A. Bogdanov, Y. Kivshar, M. A. Schmidt, *Appl. Phys. Rev.* **10**, 011401 (2023).

Особливості динамічних характеристик водневого флюїду з наявною дисоціацією та асоціацією

І.-М. Іленков^a, Т.М. Брик^{a,b}

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

^bНаціональний університет «Львівська політехніка», вул. Степана
Бандери, 12, 79013 Львів, Україна, E-mail: bryk@ictp.lviv.ua

Флюїд водню, що перебуває в термодинамічному регіоні з низьким тиском буде знаходитись у молекулярному стані. Збільшенням температури чи тиску у системі можна досягнути повної чи часткової дисоціації молекул H_2 . У перехідній області, за тиску $\sim 10^5$ бар та температури ~ 2500 К, можна спостерігати сталий процес дисоціації молекул H_2 та асоціації нових з відокремлених атомів. Динаміка системи за таких умов є достатньо складною, з огляду на зникнення розрізненості міжчастинковими взаємодіями та внутрішніми ступенями свободи молекул. Збільшуючи тиск у такій системі можна досягнути її повної дисоціації та металізації, хоча взаємозв'язок та детальний механізм виникнення цих процесів досі не є встановлений. Вищезгадані ефекти можна спостерігати тільки в моделюванні методом *ab initio* молекулярної динаміки (AIMD).

Саме тому, дослідження такої системи здійснювалось нами за допомогою методу AIMD з використанням програмного пакету VASP. Ми розглядали 500 молекул H_2 за температури 2500 К та діапазону тисків від 2 до 100 ГПа. Обчислення часових кореляційних функцій були проведені на основі одержаних траєкторій частинок. В результаті, були одержані автокореляційні функції швидкостей для декількох значень тисків. Що, в свою чергу, дозволило нам отримати спектральні розподіли цих кореляційних функцій.

Інженерія плазмонних анізотропних метаповерхонь на основі золотих нанопластин

А. Грінченко^a, С. Полевой^b, О. Дем'яник^a, О. Єрмаков^a

^aХарківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна, E-mail: artitus1509@gmail.com

^bІнститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН України, вул. Академіка Проскури, 12, 61085 Харків, Україна

Гіперболічні метаповерхні відомі своїми дисперсійними та поляризаційними властивостями, такими як від'ємне заломлення, гіперлінзування, посилене спонтанне випромінювання тощо [1]. Поверхневі хвилі, локалізовані на гіперболічних метаповерхнях, називаються гіперболічними плазмон-поляритонами і мають багато потенційних застосувань для планарних технологій [2].

У цій роботі ми аналізуємо залежності спектральних положень резонансів і спектральної ширини смуги пропускання гіперболічного режиму для метаповерхонь на основі квадратних масивів нанодисків [3] і прямокутних нанопластин. А саме, ми досліджуємо резонансні характеристики метаповерхонь, варіюючи розмір наночастинок, ступінь розтягування (анізотропії) та період метаповерхні від ізотропного до екстремально анізотропного випадку. У результаті визначено квадратичну залежність спектральної ширини для одного з резонансів від ступеня анізотропії, коли електричне поле орієнтоване вздовж напрямку розтягування. Крім того, продемонстровано режим плазмонного каналювання, який характеризується плоским ізочастотним контуром і самоколімованим односпрямованим поширенням поверхневої хвилі. Каналювання відбувається в околі одного з резонансів, що підкреслює актуальність інженерії метаповерхонь для плоскої передачі оптичного сигналу.

[1] Takayama O., Lavrinenko A.V., *J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys.* **36**, 38–48 (2019).

[2] Gomez-Diaz J.S., Alu A., *ACS Photonics* **3**(12), 2211-2224 (2016).

[3] Hrinchenko A., Yermakov. O., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **56**(46), 465105 (2023).

Енергетичний спектр та низькотемпературні властивості спінової моделі, побудованої зі скінченних XX ланцюжків, зв'язаних в «сніп» ізінгівськими спінами

А. Кабатова, О.В. Єзерська

Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, фізичний факультет, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна,

E-mail: kabatova.anna@ukr.net

Робота присвячена теоретичному дослідженню квантових стаціонарних станів і термодинаміки точно розв'язуваної квантової моделі, побудованої з однакових скінченних XX ланцюжків ($s = 1/2$), зібраних ізінгівською взаємодією у «сніп» через один проміжний вузол з однаковим номером вузла для кожного XX ланцюжка. Гамільтоніан моделі, що розглядається, має наступний вигляд:

$$\hat{H} = - \sum_{l=1}^L \left[g_0 \mu_B H \sigma_{l,n_0}^z + J_0 \left(\sigma_{l,n_0}^z + \sigma_{l+1,n_0}^z \right) S_{l,n_0}^z \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^N g \mu_B H S_{l,n}^z + J \sum_{n=1}^{N-1} \left(S_{l,n}^x S_{l,n+1}^x + S_{l,n}^y S_{l,n+1}^y \right) \right].$$

Z-проекції ізінгівських спінів є гарними квантовими числами, які можна розглядати, як додаткові параметри гамільтоніану. Трансляційна симетрія моделі дозволяє представити гамільтоніан моделі, як

$$\hat{H}_1(\sigma_1, \dots, \sigma_l, \sigma_{l+1}, \dots, \sigma_L) = \sum_{l=1}^L \hat{H}(\sigma_l, \sigma_{l+1})$$

та використати для моделювання термодинаміки метод трансфер-матриці.

Було досліджено польові та температурні залежності намагніченості та теплоємності, польові залежності середніх значень $\langle \sigma_{l,n_0}^z \rangle$ та парних кореляційних функцій сусідніх ізінгівських декоруючих спінів $\langle \sigma_{l,n_0}^z \sigma_{l+1,n_0}^z \rangle$ для випадку $S_0 = 1/2$. При певних умовах корелятор $\langle \sigma_{l,n_0}^z \sigma_{l+1,n_0}^z \rangle$ приймає нульове значення в полі $g_0 \mu_B H = J_0$.

Автори висловлюють подяку IEEE via "Magnetism in Ukraine Initiative" (STCU project No. 9918) за підтримку.

Термодинаміка Гайзенбергового феромагнетика зі спіном 1/2 на ґратці гіперкагоме

М. Паримуда, О. Держко, Т. Крохмальський

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

Термодинамічні властивості спін-1/2 Гайзенбергового феромагнетика на ґратці гіперкагоме були досліджені з використанням кількох методів, що дозволяють описати поведінку спінових систем при різних температурах.

Перший метод – це метод лінійних спінових хвиль. Цей метод полягає в розгляді спінових збуджень у вигляді квазічастинок, званих магнонами. Для систем зі спіном 1/2 на фрустрованих ґратках, таких як гіперкагоме, використання цього методу дозволяє наблизити описати низькотемпературні властивості, оскільки система збуджень може бути розглянута як система вільного магнонного газу.

Другий метод – це метод двочасових функцій Гріна, а саме наближення Тяблікова. На відміну від теорії лінійних спінових хвиль, цей метод працює не тільки при низьких температурах. Саме тому цей метод дозволяє знайти точку Кюрі.

Нарешті було використано числовий метод – квантове Монте Карло. Цей метод застосовується для розв'язку задач багатьох тіл, зокрема для спінових систем, шляхом статистичних симуляцій.

Порівняння аналітичних результатів із числовими симуляціями дозволяє оцінити точність різних наближень та визначити, наскільки успішно вони описують реальну фізичну систему. Таким чином, використовуючи комбінацію аналітичних і числових методів, вдалося дослідити ключові термодинамічні характеристики Гайзенбергового феромагнетика зі спіном 1/2 на ґратці гіперкагоме та отримати наближений опис його термодинамічної поведінки.

Це дослідження профінансовано Національним фондом досліджень України (2023.03/0063, Фрустровані квантові магнетики за різних зовнішніх умов).

Stochastic theory of domain structure formation in uniaxial ferroelectrics

O. Mazur

*Technical University of Liberec, Halkova, 917, 41617 Liberec, Czech Republic,
E-mail: o.yu.mazur@gmail.com*

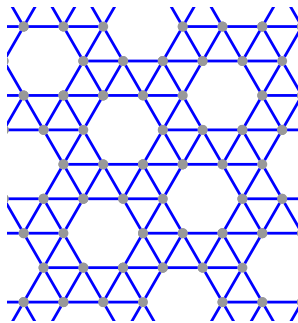
Ferroelectric materials are widely utilized in modern materials science and device fabrication due to their nonlinear properties, which are closely linked to their domain structures. Understanding the dynamics of domain ordering under highly nonequilibrium conditions is crucial for controlling relaxation processes and self-organization within the domain structure, thereby enabling the production of materials with tailored properties. Using the Ginzburg-Landau-Devonshire phenomenological theory, a stochastic model that predicts the complete evolution of the domain structure from its initial state to thermodynamic equilibrium, influenced by external factors was developed. Through correlation analysis, analytical expressions for a comprehensive set of two-point correlation functions, including both polarization and depolarizing field components, as well as cross-correlation functions between them were derived. Symmetry considerations reveal that certain correlations vanish along specific directions and planes, but overall, they significantly influence domain structure development and allow for the determination of key parameters, such as correlation length. These expressions serve as valuable tools for analyzing domain images obtained through phase-field simulations and experimental techniques such as second harmonic generation, atomic force microscopy, scanning electron microscopy, and piezoresponse force microscopy.

Термодинаміка $S = 1/2$ антиферомагнетика Гайзенберга на ґратці «кленовий лист»

Т. Гутак

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

Нещодавні експерименти над мінералом блюбелліту $\text{Cu}_6\text{IO}_3(\text{OH})_{10}$ [1], в якому магнітні іони міді формують ґратку «кленовий лист», оживили теоретичні дослідження антиферомагнітної моделі Гайзенберга на цій ґратці. Останні числові дослідження показують, що в основному стані перехід між квазікласичним скошеним 120° магнітним порядком і кристалом валентних зв'язків відбувається через проміжну фазу квантової спінової рідини [2–4]. Однак дослідження моделі при скінченних температурах наразі відсутні.



Ми розглянемо термодинаміку $S = 1/2$ антиферомагнітної моделі на ґратці «кленовий лист» використовуючи високотемпературні розвинення. Для дослідження теплоємності на всьому інтервалі температур проведемо інтерполяцію між низькими і високими температурами в рамках методу ентропії [5].

- [1] Y. Naraguchi, A. Matsuo, K. Kindo, and Z. Hiroi, *Phys. Rev. B* **104**, 174439 (2021).
- [2] D. J. J. Farnell, R. Darradi, R. Schmidt, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **84**, 104406 (2011).
- [3] P. Ghosh, T. Müller, and R. Thomale, *Phys. Rev. B* **105**, L180412 (2022).
- [4] L. Gresista, C. Hickey, S. Trebst, and Y. Iqbal, *Phys. Rev. B* **108**, L241116 (2023).
- [5] B. Bernu and C. Lhuillier, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 057201 (2015).

ЕДТА при різних рівнях протонації для хелатування іонів ртуті у водному розчині

Г. Бутович^{a,b}, Ф. Кешаварз^b, Б. Барб'єлліні^{b,e}, Е. Лахдеранта^{b,d},
Я. Льницький^{a,c}, Т. Пацаган^{a,c}

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

^bТехнологічний Університет Лаптеєнранти, Лаптеєнранта, Фінляндія

^cНаціональний університет «Львівська політехніка», Інститут
прикладної математики та фундаментальних наук,
вул. Митрополита Андрея, 5, Львів, Україна

^dУніверситет Балеарських островів, фізичний факультет, Пальма,
Іспанія

^eПівнічно-Східний Університет, фізичний факультет, Бостон, США

Етилендіамінтетраоцтова кислота (ЕДТА) широко використовується в промисловості і медицині, в тому числі у хелатуванні важких металів. В даній роботі досліджується адсорбція іонів ртуті (Hg^{2+}) молекулами ЕДТА у воді. Розглядаються різні рівні протонації ЕДТА, які залежать від рН водного середовища. Використовуючи методи молекулярної динаміки і квантово-хімічні розрахунки, розраховано структурні характеристики отриманих комплексів Hg^{2+} -ЕДТА та значення енергії адсорбції іона. Показано, що у повністю депротонованій формі ЕДТА проявляє найвищу хелатуючу здатність стосовно іонів ртуті.

Геометричні ефекти на функціональній поверхні

Д. Яремчук^a, Я. Ільницький^a, Р. Баденхорст^b, С. Макаєв^b, С. Мінько^b

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

^bNanostructured Material Lab, University of Georgia, Athens, 30602 Georgia,
USA, E-mail: sminko@uga.edu

Досягти контрольованої адсорбції/десорбції колоїдних частинок важливо з точки зору застосувань при сортуванні клітин, збиранні і вирошуванні мікрободорослей, сепарації колоїдів, доставці ліків. Температурно контрольована зміна адгезивних властивостей може реалізуватися на поверхнях вкритих полімером poly(N-isopropyl-acrylamide) або (ПНІ-ПАМ). Над нижньою критичною температурою розчинності (НКТР) ПНІ-ПАМ погано розчиняється у воді і перебуває у сколапсованому стані, а нижче $T < \text{НКТР}$ він розчинний і може набрякати. Перспективним з точки зору коштовності методом виготовлення такої поверхні є покриття розкручуванням (spin coating). В групі С. Мінька було запропоновано такий метод де окрім ПНІПАМ присутні острівці зшитого полістиролу, що дозволяє більший контроль над адгезивними властивостями поверхні.

Для збільшення ефективності адсорбції/десорбції і оптимізації протоколу виготовлення таких поверхонь, корисним є розробка методу передбачення властивостей цих поверхонь із даних їхньої структури. Однією із можливих характеристик є глибина “просідання” колоїдної частинки опертої на сусідні полістиренові домени, яка може грубо передбачати енергію десорбції. Глибина просідання колоїдної частинки залежить тільки від геометричних властивостей поверхні, більшість інформації про які можна отримати із допомогою силового і оптичного мікроскопа. В даній роботі ми розглянули можливий вплив геометричних ефектів попередньо приготованого зразка на глибину просідання колоїдів різного розміру. Серед попередніх висновків можна виділити наступне: варіація радіусу кривизни полістиренових доменів мало впливає на глибину просідання; варіація висоти доменів навпаки є суттєвим фактором; також є важливим розмір колоїдної частинки.

Підсилення кірального детектування за допомогою плазмонних структурованих метаповерхонь

О. Дем'яник^a, С. Полевой^b, В. Туз^a, О. Єрмаков^a

^aХарківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна, E-mail: o.demianuk@gmail.com

^bІнститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН України, вул. Академіка Проскури, 12, 61085 Харків, Україна

Кіральність позначає здатність відповідного об'єкта мати своє дзеркальне відбиття, не тотожне оригіналу. Основна складність під час вимірювання кіральних речовин полягає в необхідності виявлення надзвичайно слабких хіроптичних сигналів від невеликої концентрації кіральних молекул. Метою нашої роботи є розробка методу, який дозволить виявляти невеликі концентрації кіральних молекул з високою точністю в режимі реального часу.

У дослідженні спочатку збуджується поверхнева хвиля, за допомогою призми у режимі повного внутрішнього відбиття, плоскою ТМ-поляризованою хвилею. У цьому випадку виникає малий відгук у ТЕ-поляризації за рахунок зв'язування електричного та магнітного полів. У результаті виникає кутовий зсув між спектральними резонансами в правій- та лівій циркулярно поляризованих хвилях через присутність кіральної речовини. Щоб охарактеризувати чутливість детектування кіральної речовини розглянуто амплітуду та фазу диференціального відбиття та залежність кутового зсуву від параметра кіральності.

Основне завдання нашої роботи - збільшити кут розбіжності між піками спектрів відбиття для лівої та правої кругових поляризацій та, відповідно, ефективність кірального детектування. Це може бути досягнуто за рахунок підсилення відгуку в ТЕ поляризації. Знайдено оптимізовану конструкцію золотих тонких нанограток на склі ВК-7, що забезпечує покращення кіральної чутливості приблизно на два порядки величини порівняно з неструктурованою золотою тонкою плівкою. У цьому випадку спостерігається підсилення коефіцієнта диференціального відбиття майже в 100 разів більше для випадку оптимізованої наногратки в порівнянні з плівкою. Таким чином, просте вимірювання дозволить нам визначити, чи має кіральна речовина D (+) або L (-) тип енантіомерів.

Ефективна критична поведінка в моделі Блюме-Капеля на повному графі

Ю. Гончар^{a,b,d}, М. Красницька^{a,d}, Б. Берш^{c,d}, Ю. Головач^{a,d},

Р. Кенна^{b,d}

^aІнститут фізики конденсованих систем НАН України,

вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна

^bУніверситет Ковентрі, Ковентрі, Сполучене Королівство

^cУніверситет Лотарингії, Нансі, Франція

^dСпівпраця \mathbb{L}^4 & Докторський коледж із статистичної фізики складних систем, Ляйпціг-Лотарингія-Львів-Ковентрі, Європа

Скінченновимірний скейлінг (finite-size scaling) є ефективним методом вивчення критичної поведінки у системах скінченного розміру і відповідних асимптотичних продовженнях. У цій роботі ми розглядаємо тристанову модель спінів — модель Блюме-Капеля на повному графі, де спіни можуть приймати значення $\pm 1, 0$. На повному графі всі спіни взаємодіють один з іншим з рівною силою, що рівнозначне середньопольовому підходу. Тому в термодинамічній границі ця задача є точно розв'язаною. Тим часом, ефективні фазові переходи на таких графах скінченного розміру досліджені менше. Ми досліджуємо нулі статистичної суми при комплексній температурі, комплексному зовнішньому полі (відповідно нулі Фішера та Лі-Янга), а також комплексному кристалічному полі, яке контролює анізотропію кристала. Наш головний інтерес - різниця критичної та трикритичної поведінки і спостереження кроссоверу між цими двома режимами. В результаті ми порівнюємо фазову діаграму безмежної системи, яка отримується точно, з ефективною фазовою діаграмою, яка наводиться з результатів аналізу нулів статистичної суми. Отримані кути перетину нулів з дійсною віссю та асимптотики скінченновимірного скейлінгу задовільняють очікувані співвідношення для показників та критичних амплітуд.

Авторський покажчик

- Mazur O., 30
- Romanczuk P., 14
- Sarkanych P., 14
Sevinchan Y., 14
- Багрова О.М., 13
Баденхорст Р., 33
Барб'єлліні Б., 32
Берш Б., 35
Брик Т.М., 23, 24, 26
Бутович Г., 32
- Герасимчук А.А., 21
Головач Ю., 14, 19, 35
Гончар Ю., 35
Горбатенко Ю.В., 15
Грінченко А., 27
Гусинін В.П., 21
- Демчук Т., 24
Дем'яник О., 27, 34
Держко О., 29
Добуш О.А., 17
Дудка М., 19
- Єзерська О.В., 20, 28
Єрмаков О., 25, 27, 34
- Іленков І.-М., 26
Ільницький Я., 32, 33
- Їдак І., 23
- Кабатова А., 28
- Кенна Р., 35
Кешаварз Ф., 32
Козловський М.П., 17
Кононенко С., 20
Коняхін С.В., 13
Копча М., 23
Королук О.О., 15
Красницька М., 35
Кривчіков О.І., 15
Крохмальський Т., 29
- Лахдеранта Е., 32
Лімарев Є.Д., 22
- Макаєв С., 33
Мінько С., 33
- Паримуда М., 29
Пацаган Т., 32
Пилюк І.В., 17
Полевой С., 27, 34
Пустовіт Ю.В., 22
- Романік Р.В., 17
Романцова О.О., 15
- Сотніков А.Г., 18
- Туз В., 34
- Унукович В.І., 18
- Шаповал Д., 19
Шарапов С.Г., 21
- Яремчук Д., 33

Для нотаток

XXIV Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2024
Львів, 24–25 жовтня 2024 р.

Збірка тез

© Інститут фізики конденсованих систем НАН України
Львів, 2024

Комп'ютерне макетування: Андрій Швайка

Укладання: Данило Добушовський

Графічний дизайн: Петро Сарканич

Підтримка:

