



Львів, 30-31 жовтня 2025

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

**зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини**

Збірка тез



**Інститут фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України**

**XXV Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2025**

**Львів, 30–31 жовтня 2025 р.
Інститут фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України**

ПРОГРАМА ТА ТЕЗИ

Львів — 2025

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

В програмі:

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

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

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

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

Робоча мова семінару — українська.

Адреса для контактів

Рада молодих вчених ІФКС ім. І.Р. Юхновського 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: <https://icmp.lviv.ua/konkurs/>

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

**XXV Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2025**

Програма

Львів, 30–31 жовтня 2025 р.

Четвер, 30 жовтня 2025 р.

09:00 – 09:10 ТАРАС МИХАЙЛОВИЧ БРИК
Вітальне слово від організаторів
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

Засідання I

Головує ТАРАС МИХАЙЛОВИЧ БРИК

09:10 – 10:10 Запрошена лекція
ІГОР МИРОНОВИЧ МРИГЛОД
Метод колективних змінних і його застосування у теорії класичних багаточастинкових систем
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

10:10 – 10:25 КИРИЛО БОГАЧОВ
Аналіз ARPES спектрів надпровідних купратів із використанням нейронних мереж
ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ

10:25 – 10:40 СТАНІСЛАВ КУЗЬМІН
Застосування моделі потенціалу нульового радіусу до обчислення електронної структури молекул
ОНУ ім. І.І. Мечникова, Одеса

10:40 – 10:55 ЄВГЕН ОСОКІН
Квантово-хімічне моделювання комплексів іонів Ag⁺ з азотистими основами ДНК
ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ

10:55 – 11:10 ОКСАНА ДОБУШ
Вплив мікроскопічних параметрів на фазову поведінку коміркової моделі плинину із взаємодією Кюрі-Вейса
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів

11:10 – 11:30 Перерва

Четвер, 30 жовтня 2025 р.

Засідання II

Головує РОМАН ВАСИЛЬОВИЧ РОМАНІК

- 11:30 – 12:30 Запрошена лекція
ОЛЕКСАНДР АНАТОЛІЙОВИЧ КОРДЮК
Проектування нових квантових матеріалів та їх застосувань на основі електронної структури
КАУ, Київ
- 12:30 – 12:45 Юлія Горбатенко
Дослідження температурних залежностей теплопровідності trGO-композитів та їх порівняльний аналіз з іншими вуглецевими матеріалами
ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків
- 12:45 – 13:00 ПЕТРО САРКАНИЧ
Collective decision making on a scale-free network
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
L⁴ Collaboration & Doctoral College, Europe
- 13:00 – 13:15 Галина Бутович
Хелатування іонів ртуті лінійними ланцюжками поліетиленіміну у водному розчині
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
Lappeenranta-Lahti University of Technology, Lappeenranta, Finland
- 13:15 – 14:30 Обідня перерва

Четвер, 30 жовтня 2025 р.

Засідання III

Головує Ігор Миронович Мриглод

- 14:30 – 15:30 Запрошена лекція
ЕДУАРД ВОЛОДИМИРОВИЧ ГОРБАР
Електронні властивості діраківських та вейлівських напівметалів
КНУ ім. Т. Шевченка, Київ
- 15:30 – 15:45 КИРИЛО КОВАЛЬЧУК
Ефективне імпульсне джерело Бозе-конденсату квантових газів
КНУ ім. Т. Шевченка, Київ
- 15:45 – 16:00 НАЗАР КУКАРКІН
Контактні значення між сегментами тримерів та мономерами в еквімолярній бінарній суміші
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 16:00 – 16:15 РОМАН СКОРОХОД
Моделювання радіаційно-підсиленої дифузії в полікристалі α -Fe за умов іонного опромінення
ІПФ НАН України, Суми
- 16:15 – 16:30 АРСЕН ПАНАС
Енергія основного стану частинки в просторі з мінімальною довжиною та імпульсом
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 16:30 – 16:50 Перерва

Четвер, 30 жовтня 2025 р.

Засідання IV

Головує Андрій Дмитрович Трохимчук

- 16:50 – 17:05 ТАРАС ДЕМЧУК
*Дослідження анізотропії росту нанокристалів CsPbBr_3
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів*
- 17:05 – 17:20 МАРІЯ КОПЧА
*Дослідження впливу типу головної групи лігандів на їх
зв'язування з нанокристалом CsPbBr_3 за допомогою
комп'ютерного моделювання
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів*
- 17:20 – 17:35 ДМИТРО ЯРЕМЧУК
*Термовідгук структурованої поверхні
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів*

П'ятниця, 31 жовтня 2025 р.

Засідання V

Головує Андрій Михайлович Швайка

- 09:00 – 10:00 Запрошена лекція
Христина Павлівна Гнатенко
**Квантові обчислення та їх застосування для
розв'язання фундаментальних та прикладних задач**
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 10:00 – 10:15 Тарас Гутак
**Теплоємність двопідграткових і фрустрованих
тривимірних квантових магнетиків Гайзенберга**
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 10:15 – 10:30 Олександр Закревський
**Вимірювання відгуку Лошмідта у спінових системах на
квантовому комп'ютері**
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 10:30 – 10:45 Станіслава Літвінова
**Індуковане спрямоване тунелювання крізь
асиметричні потенціальні бар'єри в одновимірній
моделі Фермі-Габбарда**
ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Харків
- 10:45 – 11:00 Максим Паримуда
**Магнетотермодинаміка антиферомагнітної моделі
Гайзенберга на ґратці Тасакі в зовнішньому
магнітному полі**
ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
- 11:00 – 11:20 Перерва

П'ятниця, 31 жовтня 2025 р.

Засідання VI

Головує ТАРАС МИКОЛАЙОВИЧ ПАЦАГАН

- 11:20 – 12:20 Запрошена лекція
СТАНІСЛАВ ЙОСИПОВИЧ ВІЛЬЧИНСЬКИЙ
**Генерація лептонної та баріонної асиметрій у
ранньому Всесвіті**
КНУ ім. Т. Шевченка, Київ
- 12:20 – 12:35 ОЛЕКСАНДР КОНСТАНТИНОВ
**Поздовжній ефект Джозефсона в двошарових
системах з електрон-дірковим спарюванням**
ФТПНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, Харків
- 12:35 – 12:50 ДМИТРО ШАПОВАЛ
**Моделювання реакційно-дифузійних процесів у
структурно неоднорідних середовищах методом
Монте-Карло**
*ІФКС ім. І.Р. Юхновського НАН України, Львів
 $\mathbb{L}^4$ Collaboration & Doctoral College, Europe*
- 12:50 – 13:05 ДМИТРО МЕЛЬНИКОВ
**Термодинамічні властивості двовимірних
гексагональних структур на прикладі графену та
сіліцену**
ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ
- 13:05 – 13:20 АНДРІЙ СМЕТАНА
**Аналітичне дослідження двоспінової запутаності,
створеної різними типами бозонових середовищ**
ЛНУ ім. І. Франка, Львів
- 13:20 – 14:30 Обідня перерва
- 14:30 – 15:00 Підбиття підсумків

**XXV Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2025**

Доповіді школи-семінару

Львів, 30–31 жовтня 2025 р.

Аналіз ARPES спектрів надпровідних купратів із використанням нейронних мереж

К. Богачов^a, О.А. Кордюк^{b, a}

^a Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бул. Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна,
E-mail: bogachov.kyrylo@gmail.com

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

Представлено підхід до аналізу ARPES спектрів високотемпературних купратів, що поєднує моделювання фізичних процесів із методами машинного навчання. Особливу увагу приділено впливу надпровідності на форму спектра та стабільності розпізнавання двошарового розщеплення.

У моделі надпровідність вводиться через температурно залежну енергетичну щільність, що відкривається нижче критичної температури, а також через змішування електронних і діркових станів, характерне для надпровідників. Додатково враховано псевдощілинний ефект, який приглушує інтенсивність поблизу рівня Фермі та імітує часткову втрату когерентності електронів вище T_c . Таким чином, модель описує плавний перехід між нормальним і надпровідним станами та дозволяє відтворювати ключові риси експериментальних спектрів.

Згенеровані синтетичні дані використовувалися для навчання двох згорткових нейронних мереж: класифікаційної — для визначення наявності двошарового розщеплення, та регресійної — для оцінки його величини. Отримано точність класифікації 83% (раніше без надпровідності 86%) і коефіцієнт детермінації $R^2 = 0.88$ (проти 0.87). Тестування на реальних спектрах показало стабільне виявлення двошарового розщеплення, хоча абсолютні значення дещо різняться.

Результати свідчать, що навіть спрощена модель без надпровідності дає схожі результати, тоді як введення надпровідного та псевдощілинного описів підвищує фізичну узгодженість без суттєвої зміни точності машинного розпізнавання.

Робота була виконана за підтримки Міністерства освіти і науки України (№ держреєстрації 0125U002068).

Застосування моделі потенціалу нульового радіусу до обчислення електронної структури молекул

С. Кузьмін, В.Л. Кулінський

*Одеський національний університет ім. І.І. Мечникова, факультет математики, фізики та інформаційних технологій,
вул. Змієнка Всеволода 2, 65082 Одеса, Україна*

Дослідження присвячено проблемі створення ефективного методу обчислення електронної структури молекул і штучних багатоатомних з'єднань на основі розв'язуваної моделі потенціалу нульового радіусу. В ній задача знаходження хвильової функції зв'язаного стану зводиться до суто алгебраїчної задачі відшукування нетривіальних розв'язків систем лінійних алгебраїчних рівнянь, а енергії іонізації окремих атомів та довжини електронних зв'язків є єдиними вхідними параметрами. Таким чином, електронні структури двоатомних молекул, таких як водень та гідрид літію, структур з високою симетрією, таких як метан та аміак, а також молекул стабільних сполук C_{20} розглядаються єдиним чином. Єдина відмінність полягає в кількості обчислень, необхідних для оцінки енергетичних спектрів молекул, оскільки вони зростають зі збільшенням кількості атомів у молекулі. Але для молекул високої симетрії можна спростити розрахунки, як це було продемонстровано у випадках метану, аміаку та стабільних сполук C_{20} . Результати обчислень відрізняються від експериментальних даних менше, ніж на 5 відсотків. Завдяки такій простоті та точності метод потенціалів нульового радіусу можна розглядати як альтернативу методам функціоналу густини та *ab initio*. Подальший розвиток моделі потенціалу нульового радіусу з урахуванням індивідуальних характеристик композитних систем призводить до отримання простого інструменту для опису електронних властивостей не лише окремих молекул, але й квантових точок і низьковимірних локалізованих дефектів.

Квантово-хімічне моделювання комплексів іонів Ag^+ з азотистими основами ДНК

Є.С. Осокін, С.М. Перепелиця

*Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14-б, 03143 Київ, Україна, E-mail: osokin@bitp.kyiv.ua*

Застосування металізованої ДНК як новітнього матеріалу потребує дослідження фізичних властивостей комплексів іонів металів з її структурними елементами: азотистими основами, фосфатними групами та дезоксирибозою. В даній роботі представлені результати квантово-хімічного моделювання нейтральних та заряджених комплексів іонів Ag^+ з азотистими основами (тиміном, цитозином, 5-бромцитозином та гуаніном) з метою встановити будови та умов стабільності цих комплексів. Розрахунки виконувались в рамках теорії функціоналу густини (DFT) у програмному пакеті Gaussian. Атоми Аргентуму описувались базисним набором Def2-TZVP ECP. Для опису органічних молекул використовувався базисний набір 6-311++G(d, p). Тестувалися сольватаційні моделі PCM та SMD. Модель SMD виявився найбільш коректною за результатами моделювання йонів Аргентуму з азотистими основами. В результаті показано, що комплекси $[\text{Ag}^+ - T(N3)]^0$ та $[\text{Ag}^+ - G(N1)]^0$ є найстабільнішими серед досліджуваних сполук, а комплекси $[\text{Ag}^+ - A(N1)]^0$ – навпаки найменш стабільними. Цей факт пояснює чому в експерименті з рентгеноструктурного аналізу Ag-ДНК [1] аденін виходить назовні макромолекули, а інші азотисті основи залишаються всередині подвійної спіралі, формуючи стабільні комплекси з Ag^+ .

[1] J. Kondo, Y. Tada *et al.*, *Nature chemistry*, **9**(10), 956-960i (2017).

Вплив мікроскопічних параметрів на фазову поведінку коміркової моделі плинну із взаємодією Кюри-Вейса

О.А. Добуш^a, М.П. Козловський^a, І.В. Пилук^a, Ю.О. Плевачук^{b,c}

^a Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна

^b Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра фізики
металів, вул. Кирила і Мефодія, 8, 79005 Львів, Україна

^c Інститут фізики, Словацька академія наук,
Дубравська дорога, 9, 84511 Братислава, Словаччина

Досліджено, як зміна двох мікроскопічних параметрів – об'єму комірки, v , та співвідношення між інтенсивностями відштовхування та притягання, f , – впливає на фазову поведінку коміркової моделі із взаємодією типу Кюри-Вейса [1]. Результати отримано на основі точного розв'язку, отриманого раніше для цієї моделі у рамках великого канонічного ансамблю [2]. За достатньо низьких температур комірковій моделі притаманна послідовність фазових переходів першого роду. Змінюючи об'єм комірки та співвідношення відштовхування до притягання, представлено кількісне порівняння ізотерм хімічного потенціалу та тиску, а також фазових діаграм тиск-температура та температура-густина. Результати показують, що зміна об'єму комірки не впливає на фазові діаграми тиск-температура-густина. Збільшення співвідношення інтенсивності відштовхувальної до притягальної взаємодії між частинками f впливає на фазові діаграми, наприклад, розширюючи діапазон тисків, в якому існують стійкі фази, а також, зменшуючи критичну температуру. Однак зміни f не призводять до якісних змін у фазовій поведінці моделі: такі явища, як зникнення фазових переходів або поява потрійних точок, не спостерігаються.

Роботу виконано за підтримки Національної академії наук України в рамках теми державного фінансування № 0123U100238 та Секретаріату уряду Словаччини за проектом № 09I03-03-V01-00047.

[1] O.A. Dobush, M.P. Kozlovskii *et al.*, [arXiv:2505.14456](https://arxiv.org/abs/2505.14456) (2025).

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

Дослідження температурних залежностей теплопровідності trGO-композитів та їх порівняльний аналіз з іншими вуглецевими матеріалами

Ю.В. Горбатенко, В.В. Саган, 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*

Дослідження низькотемпературної теплопровідності вуглецевих матеріалів має вирішальне значення для розробки нових матеріалів з покращеними теплопровідними властивостями. Ми експериментально дослідили та проаналізували температурні залежності теплопровідності, $\kappa(T)$, термічно відновленого графену (trGO) та trGO-композитів з гідратованим фулереном (Hy-Fn), а також композитів на основі розширеного графіту (EG) з багатостінними вуглецевими нанотрубками (EG-MWCNT) у широкому температурному інтервалі. Всі температурні залежності $\kappa(T)$ досліджених матеріалів демонструють склоподібну поведінку теплопровідності [1]. У наших попередніх дослідженнях було встановлено, що склоподібна поведінка теплопровідності може бути описана у вигляді суми експоненціальних функцій, що подібні до виразу Арреніуса [2].

Було проведено аналіз температурних залежностей теплопровідності та досліджено вплив відпау та тиску на теплопровідність trGO-композиту, а також оцінили зміни в теплопровідності trGO-Hy-Fn-композитів та чистого trGO, а також залежність теплопровідності $\kappa(T)$ від густини зразків trGO-Hy-Fn. Показано, що EG-MWCNT-композити з різною густиною та товщиною демонструють поведінку $\kappa(T)$, подібну до теплопровідності trGO-композитів, які були пресовані та відпалені за різних температур.

Також було проведено нормування експериментальних та розрахункових значень теплопровідності. Було виявлено кореляцію між величинами передекспоненціальних множників κ_n та характеристичними енергіями E для всіх досліджуваних матеріалів.

Вдячність: дана робота була виконана за підтримки НФДУ в рамках проекту 2023.03/0012.

- [1] Y.V. Horbatenko, V.V. Sagan *et al.*, *Low Temp. Phys.*, **50**(5), 379-388 (2024).
- [2] O.A. Korolyuk, A.I. Krivchikov *et al.*, *Low Temp. Phys.*, **51**(9), 1048-1060 (2025).

Collective decision making on a scale-free network

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

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

^bIL⁴ Collaboration and Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems, Lviv-Leipzig-Lorraine-Coventry, Europe

^cInstitute for Theoretical Biology, Department of Biology, Humboldt Universität zu Berlin, Berlin, Germany

^dResearch Cluster of Excellence 'Science of Intelligence', Berlin, Germany

^eCentre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry, UK

^fComplexity Science Hub Vienna, Vienna, Austria

The concept of dimensionality plays a central role in the analysis of critical behaviour. The same model can exhibit critical properties that are significantly different when embedded in a two- or three-dimensional space. Scale-free networks, however, represent systems with an ill-defined notion of dimensionality. For such networks, the degree distribution exponent is known to play a role analogous to that of spatial dimensionality. In this work, we investigate how the topology of a scale-free network influences collective decision-making processes. This question is particularly relevant since real-world social networks are often considered to be scale-free. To this end, we study the model proposed by Hartnett *et al.*, which incorporates individual biases and external noise, and implement it on a scale-free network.

This research was supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG, German Research Foundation) under Germany's Excellence Strategy, EXC 2002/1 "Science of Intelligence" Project No. 390523135 and National Research Foundation of Ukraine, Project 2023.03/0099 "Criticality of complex systems: fundamental aspects and applications".

- [1] A.T. Hartnett, E. Schertzer *et al.*, [Phys. Rev. Lett.](#), **116**, 038701 (2024).
- [2] P. Sarkanych, M. Krasnytska *et al.*, [Phys. Biol.](#), **20**, 045005 (2023).
- [3] P. Sarkanych, Yu. Sevinchan *et al.*, [Condens. Matter Phys.](#), **27**(3), 33801 (2024).
- [4] Y. Sevinchan, P. Sarkanych *et al.*, [Phys. Rev. Res.](#), **7**(1), 013286 (2025).

Хелатування іонів ртуті лінійними ланцюжками поліетиленіміну у водному розчині

Г. Бутович^{a, b}, Я. Ільницький^a, Е. Лахдеранта^b, Т. Пацаган^a

^a Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна,

^b Технологічний Університет Лаптеєнранти, Лаптеєнранта, Фінляндія

Поліетиленімін (ПЕІ) широко використовується в промисловості і медицині, зокрема для хелатування важких металів, з якими амінні групи цього полімеру здатні ефективно зв'язуватися. В даній роботі досліджується адсорбція іонів ртуті (Hg^{2+}) на лінійних ланцюгах ПЕІ різної довжини у водному розчині [1]. Використовуючи методи молекулярної динаміки і квантово-хімічні розрахунки, отримано структурні характеристики досліджуваних комплексів Hg^{2+} -ПЕІ, значення енергій адсорбції іонів та проаналізовано стабільність утворених структур. Показано, що лінійна молекула ПЕІ, яка містить десять аміногруп, здатна хелатувати до чотирьох іонів Hg^{2+} . Нестабільність комплексу із п'ятьма іонами ртуті і більше можна пояснити електростатичним відштовхуванням між ними. Також показано, що молекула ПЕІ, яка містить п'ять амінних груп, утворює найбільш стабільний комплекс з одним іоном ртуті у порівнянні з ПЕІ з чотирма чи десятьма групами, що відповідає найбільшому значенню координаційного числа для іона ртуті серед розглянутих випадків. Отримані результати можуть бути корисними для розробки функціональних наноматеріалів для ефективного вилучення іонів ртуті з водного середовища.

[1] H. Butovych, J. Ilnytskyi *et al.*, [arXiv:2506.18835](https://arxiv.org/abs/2506.18835).

Ефективне імпульсне джерело Бозе-конденсату квантових газів

К.Г. Ковальчук, О.І. Якименко

Київський національний університет ім. Т. Шевченка, фізичний факультет, проспект Академіка Глушкова, 4, 03680 Київ, Україна, E-mail: kovalchukkyrlo.kk@gmail.com

Підвищення ефективності утворення Бозе-Ейнштейнівського конденсату (БЕК) - це одна з актуальних проблем сучасної фізики конденсованого стану. Існуючі методи створення БЕК включають використання охолодження випаровуванням та додаткового заглиблюючого потенціалу, відомий як дімпл, завдяки якому можна стимулювати конденсацію в заданій області. Згаданий процес супроводжується великими витратами внаслідок відкидання термічної хмари атомів. Цього можна уникнути повторно використовуючи цю хмару після кожної екстракції конденсату з системи. З метою знаходження оптимального проведення подібного процесу був проведений теоретичний аналіз для двох принципово різних ситуацій: з фіксованим бюджетом атомів та при постійному зовнішньому поповненні атомів у резервуар. Для теоретичного опису нерівноважної динаміки вибраний кінетичний підхід, який базується на пружних двочастинкових зіткненнях атомів між тепловим резервуаром та дімплом. Також враховані ефекти випаровування та тричастинкових зіткнень.

Розглянуто три узагальнених протоколів видобування атомів: перший – після екстракції в дімплі не залишається атомів, другий – коли витягається лише БЕК, третій – коли частково залишаються обидві компоненти. У випадку з фіксованим бюджетом атомів виявилось, що для перших двох схем можливо реалізувати не більше трьох екстракцій, після чого зупиняється нове формування БЕК внаслідок малої кількості атомів. Для третього протоколу можна зробити більше екстракцій за рахунок витягання меншої кількості БЕК на кожній ітерації. Стосовно випадку з зовнішнім поповненням атомами для усіх протоколів можна швидко перейти в імпульсний режим роботи. Ефективність, тобто середня швидкість екстракції атомів БЕК для кожної схеми виявилась чутливою до періоду екстракції: для першого є оптимальний діапазон з явним максимумом, для другої цей діапазон ширший, для третього оптимальний період значно менший, ніж для попередніх схем. Максимальна ефективність для першої та другої схеми приблизно однакова, для третьої вона помітно менше.

Контактні значення між сегментами тримерів та мономерами в еквімолярній бінарній суміші

Н. Кукаркін, Т.М. Пацаган

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна*

У роботі досліджено контактні значення між мономерами та сегментами гнучких і жорстких тримерів у бінарній еквімолярній суміші. Мономери та сегменти тримерів розглядаються як тверді сфери. За допомогою симуляцій методом Монте-Карло в канонічному ансамблі (NVT) отримано радіальні функції розподілу та відповідні контактні значення. Показано відмінності у контактних значеннях для жорстких і гнучких тримерів. У границі безмежного розведення встановлено, що контактне значення дорівнює відношенню доступної для контакту площі до повної площі поверхні відповідного сегмента тримера. Отримано аналітичні вирази для контактних значень у границі безмежного розведення для гнучких тримерів. Результати добре узгоджуються з даними симуляцій Монте-Карло, що підтверджує коректність розробленого підходу. Запропоновано узагальнену методику для оцінки контактних значень між крайнім сегментом гнучкого тримера та мономером при довільних співвідношеннях їхніх розмірів. Отримані результати можуть бути використані для вдосконалення асоціативної теорії іонних рідин та покращення передбачення термодинамічної теорії збурень Вертайма першого роду (TRT1) при описі систем плямистих частинок.

Моделювання радіаційно-підсиленої дифузії в полікристалі α -Fe за умов іонного опромінення

Р.В. Скороход, О.В. Коропов

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

Дослідження радіаційної стійкості матеріалів реакторобудування є актуальною задачею сучасної ядерної енергетики. Одним з підходів до вирішення зазначеної проблеми є модельні експерименти з важкими іонами [1]. Основними перевагами цього підходу є: можливість набирати високі дози за короткий час опромінення та відносно просте дослідження опромінених зразків, адже вони не є радіоактивними. Іншим підходом дослідження радіаційної стійкості є комп'ютерне моделювання, яке дозволяє як передбачити результати експериментальних досліджень, так і обирати оптимальні умови опромінення.

Мета цієї роботи полягає в числовому моделюванні просторово-часової еволюції концентрацій точкових дефектів (вакансій та міжвузельних атомів) в полікристалі α -Fe у моделі плоско паралельної конфігурації міжзеренних меж при опроміненні іонами Fe. Під час числових розрахунків концентраційних профілів точкових дефектів було враховано особливості іонного опромінення, а саме: (i) профіль швидкості продукування радіаційних точкових дефектів по глибині в матеріалі та (ii) наявність імплантованих атомів, які були отримані за допомогою програмного забезпечення SRIM-2013 [2]. В роботі продемонстровано суттєве зменшення вакансій і міжвузельних атомів на міжзеренних межах, які є ефективними стоками точкових дефектів.

- [1] G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys* (2nd ed.), New York: Springer, (2017).
- [2] J. Ziegler, M. Ziegler and J. Biersak, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., Sect. B*, vol. 268, no. 11-12, 1818–1823 (2010).

Енергія основного стану частинки в просторі з мінімальною довжиною та імпульсом

А.О. Панас

*Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра
теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12,
79005 Львів, Україна, E-mail: arsen.panas2002@gmail.com*

Було розглянуто гармонічний осцилятор у деформованому просторі з мінімальною довжиною та імпульсом

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} (1 + \alpha' \Delta x^2 + \beta' \Delta p^2),$$

та проведено оцінку енергії основного стану частинки в такому потенціалі. Отримана оцінка повністю співпадає з точним результатом отриманим шляхом розв'язку рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора у деформованому просторі з мінімальною довжиною та імпульсом [1].

Далі було узагальнено задачу і розглянуто випадок довільного потенціалу. Було визначено вигляд потенціалів до яких метод оцінки може бути застосований. В результаті розв'язку цієї проблеми отримано рівняння на знаходження мінімальної невизначеності координати, яка мінімізує енергію частинки. Аналітично це рівняння не може бути розв'язано в загальному випадку, проте воно може бути з легкістю розв'язане чисельно. У роботі запропоновано лінійне по параметрах деформації α' , β' наближення для розв'язку цієї задачі, яке при підстановці в нього потенціалу гармонічно і ангармонічного осциляторів дає результати які узгоджуються з раніше отриманими в роботах [1, 2].

Також аналізуючи рівняння на знаходження мінімальної невизначеності координати, визначено область існування розв'язків для потенціалу виду $V(x) = V_0 \left(\frac{x}{a}\right)^{2n}$ відносно параметрів деформації α' , β' та інтенсивності потенціалу V_0 та степені n цього потенціалу. Отримані результати узгоджуються з роботами: [1] для гармонічного осцилятора, [3] для частинки в потенціальній ямі з нескінченно високими стінками.

[1] Quesne C., Tkachuk V.M., *J. Phys. A: Math. Gen.*, **36**, 10373–10390 (2003).

[2] Panas A.O., Tkachuk V.M., *J. Phys. Stud.*, **28**, 4001 (2024).

[3] Pouria Pedram, *Phys. Rev. D*, **85**, 024016, (2012).

Дослідження анізотропії росту нанокристалів CsPbBr_3

Т. Демчук^a, М. Копча^a, Р. Мельник^a, А. Стельмах^b, А. Баумкетнер^a

^a Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: demchuk@ictp.lviv.ua

^b Department of Chemistry and Applied Biosciences, Institute of Inorganic Chemistry, ETH Zürich, Zürich, Switzerland

Нанокристали перовскіту галогеніду свинцю, зокрема CsPbBr_3 , привертають широкий інтерес як дослідників так і індустрії завдяки своїм оптичним властивостям — вузькосмуговій фотолюмінесценції з квантовим виходом близьким до одиниці та можливістю змінювати положення піку частоти випромінювання у широкому спектрі (410-750 нм). Такі властивості дозволяють застосовувати їх у якості колоїдних квантових точок. При цьому, властивості нанокристалів залежать від його структури, зокрема, від його форми. У попередніх роботах було емпірично встановлено анізотропний ріст нанокристалів CsPbBr_3 за присутності карбоксилатних лігандів. Пояснення такого ефекту відсутнє і може полягати як у властивостях самого нанокристалу так і у особливостях його взаємодії з середовищем. У даній роботі представлені дослідження поверхневої енергії нанокристалу CsPbBr_3 як одне з можливих пояснень анізотропії росту.

Для розрахунку поверхневої енергії різних граней нанокристалу CsPbBr_3 було застосовано метод «кристалу Ейнштейна». Він полягає у визначенні вільної енергії Гельмгольца через термодинамічне інтегрування між представленням системи у вигляді кристалу Ейнштейна та у оригінальному вигляді. Система CsPbBr_3 у об'ємній формі та у формі плитки була змодельована з допомогою пакету GROMACS за температури 300K з використанням алгоритму Ланжевєнівської динаміки. Параметри потенціалів взаємодії взяті з бази OPLS-AA/M для іонів Cs^+ і Br^- та зі статті [1] для Pb^{2+} . Було встановлено, що поверхнева енергія бічних граней є меншою за поверхневу енергію верхньої грані. Проте, різниця є недостатньо високою для пояснення анізотропії росту.

[1] A.S. de Araujo, M.T. Sonoda *et al.*, *J. Phys. Chem. B*, **111**(9), 2219-2224 (2007).

Дослідження впливу типу головної групи лігандів на їх зв'язування з нанокристалом CsPbBr₃ за допомогою комп'ютерного моделювання

М. Копча^a, Т. Демчук^a, Р. Мельник^a, А. Стельмах^b, А. Баумкетнер^a

^a Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: kopcha@ictp.lviv.ua

^b Department of Chemistry and Applied Biosciences, Institute of Inorganic Chemistry, ETH Zürich, Zürich, Switzerland

Нанокристали галогенідних перовскітів на основі свинцю CsPbBr₃ (X = Cl, Br, I) останніми роками привертають значну увагу як перспективні матеріали для оптоелектроніки завдяки поєднанню унікальних оптичних властивостей із простотою та низькою вартістю синтезу. Зокрема, нанокристали CsPbBr₃ можуть використовуватися як класичні джерела світла — у рідкокристалічних та світлодіодних дисплеях, — а також як квантові джерела випромінювання завдяки вузькосмуговій фотолюмінесценції з квантовим виходом, близьким до одиниці. Для забезпечення довготривалої стабільності перовскітних нанокристалів під час синтезу та подальшої обробки застосовуються ліганди. Вони запобігають агрегації нанокристалів, а також визначають їхню хімічну реакційну здатність, стабільність і оптичні властивості.

У цьому дослідженні проведено аналіз впливу різних типів головок лігандів, зокрема сульфонієва, амонієва та гуандінієва, на зв'язування пасивуючих лігандів із нанокристалами CsPbBr₃. Для кожної системи проведено комп'ютерне моделювання молекулярної динаміки обміну репліками (REMD) в геометрії слесу нанокристала з явним урахуванням розчинника. Як розчинники використовували суміш толуолу й ацетону у співвідношенні 1:1, що зазвичай застосовується під час очищення нанокристалів, а також циклогексан. Отримані в результаті розрахунків енергії зв'язування лігандів було проаналізовано та порівняно.

Термовідгук структурованої поверхні

Д. Яремчук^а, Я. Ільницький^а, С. Мінько^б

^а Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: yaremchuk@icmp.lviv.ua, E-mail: iln@icmp.lviv.ua

^б University of Georgia, Nanostructured Material Lab, Athens, Georgia 30602,
United States, E-mail: sminko@uga.edu

Контрольована адсорбція/десорбція колоїдних частинок важлива з точки зору застосувань при сортуванні клітин, збиранні і вирощуванні тканин, сепарації колоїдів. Температура є неінвазивним і нескладним способом контролю адгезивних властивостей поверхні, що забезпечується модифікуванням поверхні термочутливою щіткою/гелем poly (N-isopropyl-acrylamide) або (ПНІПАМ). Над нижньою критичною температурою (НКТР) ПНІПАМ погано розчиняється у воді, а нижче $T < \text{НКТР}$ він розчинний. Проте адгезивний/неадгезивний режими доступні для однорідних поверхонь тільки в певному діапазоні товщини щітки. З огляду на це в групі С. Мінька було запропоновано струкутуровані поверхні де окрім ПНІПАМ присутні острівці (домени) іншого полімеру. Це дозволяє ширший діапазон параметрів для ПНІПАМ і більший контроль властивостей поверхні.

Для приготованих струкутурованих поверхонь було виявлено зниження термовідгуку при збільшенні масової частки полімеру доменів у суміші. Провівши симуляції методом дисипативної динаміки ми розглянули просту модель де на твердих доменах у формі сферичних шапок і на субстраті між ними були пришпилені та потім зшиті в гель ланцюжки ПНІПАМ. Ми дослідили термовідгук (співвідношення висот гелю нижче/вище НКТР) для різної відстані між доменами, кривизни доменів і густини пришпилення на доменах. Густина пришпилення на доменах впливає на термовідгук найбільше. Це дозволяє розглянути модель де зниження термовідгуку всієї поверхні при зростанні масової частки доменів викликане тільки збільшенням частки гелю пришпиленого на доменах.

Теплоємність двопідграткових і фрустрованих тривимірних квантових магнетиків Гайзенберга

Т. Гутак

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєніцького, 1, 79011 Львів, Україна*

Ми розглянемо спін $S = 1/2$ феромагнітну і антиферомагнітну модель Гайзенберга на чотирьох тривимірних ґратках: простій кубічній ґратці і ґратці алмазу (двopідграткові ґратки), а також на ґратках пірохлору і гіперкагоме (геометрично фрустровані ґратки) [1]. Вплив геометрії ґратки на термодинамічну поведінку моделі Гайзенберга дослідимо на прикладі температурної залежності теплоємності. Також обговоримо нещодавню гіпотезу про виникнення так званого прихованого енергетичного масштабу для фрустрованих систем, який мав би проявляти себе у низькотемпературній поведінці теплоємності [2, 3].

Дослідження проводилися разом із Т. Крохмальським і О. Держком (ІФКС ім. І. Р. Юхновського) і виконані в рамках проекту НФДУ 2023.03/0063, «Фрустровані квантові магнетики за різних зовнішніх умов».

- [1] Т. Krokhmalskii, T. Hutak, and O. Derzhko, [arXiv:2508.17016 \(2025\)](#).
- [2] P. Popp, A. P. Ramirez, and S. Syzranov, [Phys. Rev. Lett. 134, 226701 \(2025\)](#).
- [3] A. P. Ramirez and S. V. Syzranov, [Mater. Adv. 6, 1213 \(2025\)](#).

Вимірювання відгуку Лошмідта у спінових системах на квантовому комп'ютері

О.О. Закревський

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

Досліджено функцію відгуку Лошмідта $L(t)$ як індикатор квантової когерентності у двоспінових системах з ізінгівською взаємодією. Проведено комплексний аналіз динаміки когерентності з урахуванням флуктуацій зовнішнього поля.

Розглянуто еволюцію незалежних спінів- $\frac{1}{2}$ у магнітному полі, де отримано загальний вираз для $L(t)$ у вигляді добутку односпінових відгуків. Показано, що поведінка $L(t)$ визначається арифметичними співвідношеннями між частотами, що зумовлює періодичне або квазіперіодичне відновлення когерентності.

Досліджено явище ефективної декогеренції через усереднення фазових множників. Отримано аналітичні вирази для різних моделей шуму та продемонстровано їхній вплив на процес дефазування.

Для системи двох взаємодіючих спінів розроблено формалізм, що пов'язує глобальний відгук $L(t)$ з локальними характеристиками через редувану матрицю густини та ентропію фон Неймана.

Експериментальна частина реалізована на квантовому процесорі IBM Eagle. Створено квантову схему, що моделює ізінгівську еволюцію, та проведено вимірювання $L(t)$ через ймовірність $P_{00}(t)$. Отримані результати узгоджуються з теоретичними передбаченнями та підтверджують ефективність відгуку Лошмідта як інструменту діагностики квантових обчислень.

Індуковане спрямоване тунелювання крізь асиметричні потенціальні бар'єри в одновимірній моделі Фермі-Габбарда

С.С. Літвінова^a, А.Г. Сотніков^{a,b}

^aХарківський національний університет ім. В.Н. Каразіна,
Навчально-науковий інститут «Фізико-технічний факультет»,
майдан Свободи, 4, 61022 Харків, Україна,
E-mail: litvinova2022tyall@student.karazin.ua

^bНаціональний науковий центр «Харківський фізико-технічний
інститут», Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера,
вул. Академічна, 1, 61108 Харків, Україна,
E-mail: a_sotnikov@kipt.kharkov.ua

Ми досліджуємо тунельну динаміку взаємодійних фермі-газів за наявності несиметричних зовнішніх потенціалів, які можуть бути реалізовані в експериментах з ультрахолодними атомами в оптичних ґратках. Такі системи дозволяють моделювати ефекти, що характерні для конденсованих середовищ, у лабораторних умовах з надзвичайно високим рівнем контролю.

На противагу відомим ефектам для невзаємодійних квантових систем, у нашому дослідженні показано, що наявність міжчастинкової взаємодії призводить до порушення симетрії тунелювання та суттєво змінює транспортні властивості системи. Відтворено й підтверджено результати попередніх робіт щодо залежності тунельної поведінки від початкових спінових конфігурацій, а також розширено дослідження ефектів резонансного захоплення та резонансного тунелювання [1].

Окрему увагу приділено вивченню акумульованих струмів. Показано, що за наявності асиметричного потенціалу частинки з різними спінами можуть рухатись у протилежних напрямках. Отримані результати не лише розширюють уявлення про тунельні процеси в багаточастинкових квантових системах, але й можуть бути використані при розробці нанорозмірних приладів із діодоподібними характеристиками та спин-залежними транспортними властивостями.

Автори висловлюють подяку за підтримку Національного фонду досліджень України за конкурсом «Передова наука в Україні» (2024-2026 рр.), проект № 0124U004372.

[1] E. Bilokon, V. Bilokon *et al.*, *Commun. Phys.* **8**, 259 (2025).

Магнетотермодинаміка антиферромагнітної моделі Гайзенберга на ґратці Тасакі в зовнішньому магнітному полі

М. Паримуда

*Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свєнціцького, 1, 79011 Львів, Україна,
E-mail: mparymuda@ictp.lviv.ua*

Геометрична фрустрація виникає, коли сусідні обмінні взаємодії неможливо задовольнити одночасно, унаслідок цього формується сильно вироджені основні стани і спостерігається нетипова низькотемпературна поведінка. Трикутна ґратка є одна з відомих прикладів фрустрованої геометрії й слугує еталоном для дослідження екзотичних магнітних фаз, зокрема квантових спінових рідин. Особливо цікавим випадком є декорована ґратка Тасакі, яку отримують шляхом "декорування" одновимірного ланцюга додатковим вузлом на кожному зв'язку, утворюючи систему кутоспільних трикутників.

Ми розглядаємо антиферромагнітну модель Гайзенберга зі спіном $S = 1/2$ на ґратці Тасакі в однорідному зовнішньому полі h . Основну увагу приділено окілу поля насичення $h = 0.99h_{sat}$ і $h = 1.01h_{sat}$. Аналітичним методом Бакстера "жорсткі квадрати" ми виводимо компактні вирази для ключових термодинамічних величин як функцій температури T і поля h .

Для перевірки аналітичного методу ми виконали числову точну діагоналізацію для малих та великих розмірів ґратки Тасакі. Отримані чисельні магнетоермодинамічні криві добре узгоджуються з аналітичними передбаченнями в низькотемпературному діапазоні, що підтверджує коректність і узгодженість аналітичної теорії при низьких температурах.

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

Поздовжній ефект Джозефсона в двошарових системах з електрон-дірковим спарюванням

О.М. Константинов, С.І. Шевченко

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

В роботі вивчено проблему бездисипативних поздовжніх струмових станів у двошарових системах зі спарюванням просторово розділених електронів та дірок за наявності потенційного бар'єру, що поділяє систему на дві макросистеми (праву та ліву) [1]. Показано, що характер залежності поздовжнього струму від матричних елементів тунелювання через бар'єр значною мірою визначається ступенем розрідженості системи.

Для систем високої густини, в яких розмір електрон-діркових пар набагато перевищує середню відстань між парами, струм пропорційний добутку матричних елементів тунелювання через бар'єр в електронному та дірковому шарах. Це, зокрема, означає, що для виникнення поздовжнього ефекту Джозефсона в двошаровій електрон-дірковій системі високої густини потрібна наявність слабкого зв'язку в обох шарах. Даний результат отримано двома методами: методом тунельного гамільтоніана та методом t -подання.

У системах низької густини струм пропорційний середньому гармонійному матричних елементів тунелювання. Цей результат означає, що навіть за відсутності бар'єра в одному з шарів поздовжній ефект Джозефсона буде мати місце завдяки сильному зв'язку компонент пари. У випадку, коли потенційні бар'єри в електронному та дірковому шарах віддалені на відстань, що значно перевищує довжину когерентності, фаза параметра порядку зазнає стрибка на кожному з бар'єрів, що відповідатиме двом послідовним джозефсонівським контактам.

Отримані результати демонструють, що у двошарових системах зі спарюванням просторово розділених електронів та дірок через поперечний до шарів потенційний бар'єр можуть протікати недисипативні поздовжні електричні струми.

[1] S.I. Shevchenko, O.M. Konstantynov, [Low Temp. Phys.](#), **51**, 1245–1255 (2025)

Моделювання реакційно-дифузійних процесів у структурно неоднорідних середовищах методом Монте-Карло

Д. Шаповал^{a,b}, В. Блавацька^{a,b}, М. Дудка^{a,b,c}

^a Інститут фізики конденсованих систем ім. І.Р. Юхновського
НАН України, вул. Свенціцького, 1, 79011 Львів, Україна

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

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

Досліджується задача виживання частинок-мішеней B у середовищі з рухомими частинками-пастками A , які можуть або анігілювати, або коагулювати між собою [1–3]. Середовище моделюється двовимірною ґраткою із випадковими “замороженими” дефекти, які можуть блокувати рух частинок.

За допомогою моделювання методом Монте-Карло показано, що середня густина частинок B спадає повільніше та досягає ненульового граничного значення у присутності структурного безладу порівняно з “чистою” ґраткою. Через можливу ізоляцію частинок дефектами аналізуються перколяційні кластери вільних вузлів, доступних для руху A та B . За допомогою алгоритму Гошена–Копельмана визначено перколяційну структуру, обчислено її фрактальну вимірність і досліджено вплив дефектів на динаміку частинок-мішеней B .

Додатково протестовано два типи оновлення динаміки частинок – синхронний та асинхронний режими [4]. Перший є більш обчислювально ефективним, але модельним за своєю природою, тоді як другий відтворює стохастичний характер руху частинок у реальних системах, проте вимагає більших обчислювальних ресурсів.

- [1] B. Vollmayr-Lee, J. Hanson *et al.*, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **51**, 034002 (2018); *ibid.* **53**, 179501 (2020).
- [2] J. Hellerick, R. Rhoades, B. Vollmayr-Lee, *Phys. Rev. E*, **101**, 042112 (2020).
- [3] D. Shapoval, V. Blavatska, M. Dudka, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **55**, 455002 (2022).
- [4] B. Schönfisch, A. de Roos, *Biosystems*, **51**, 123 (1999);
J. A. Miszczak, *Phys. Scr.*, **98**, 115210 (2023).

Термодинамічні властивості двовимірних гексагональних структур на прикладі графену та сіліцену

Д. Мельников, О. Пономарьов, С. Пономарьова, Ю. Коваль,
С. Кедровський

*Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бул. Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна,
E-mail: densmaillet@gmail.com, E-mail: oponomarov@imp.kiev.ua*

В рамках гармонійного наближення досліджено основні термодинамічні характеристики двовимірних гексагональних структур, таких як графен та сіліцен. Розрахунки виконані за допомогою міжатомних силових сталих отриманих як за допомогою класичних багаточастинкових потенціалів, таких як потенціал Терзофа та LCBOP, і також за допомогою потенціалів, отриманих шляхом машинного навчання.

Відомо, що за нормальних умов основний вклад у вільну енергію вносить саме фононна підсистема, тож оцінка саме вібраційної складової термодинамічних характеристик являє собою важливу задачу, що має прикладне значення. Складнощі детектування акустичних фононів поблизу центру зони Брілюєна, залежність результатів DFT розрахунків від кількості атомів у ґратці а також залежність деяких результатів від значень міжатомних силових сталих чи їх виду призводить до актуалізації застосування класичних аналітичних моделей для верифікації чи передбачення макрохарактеристик моноатомних плівок.

Отримані результати показують співпадіння з першопринципними оцінками і також дозволяють розширити аналітичну модель на квазі-гармонійне наближення.

Аналітичне дослідження двоспінової запутаності, створеної різними типами бозонових середовищ

А.І. Сметана, А.Р. Кузьмак

*Львівський національний університет ім. І. Франка, кафедра
теоретичної фізики ім. професора І. Вакарчука, вул. Драгоманова, 12,
79005 Львів, Україна, E-mail: andriysmetana00@gmail.com,
E-mail: andrijkuzmak@gmail.com*

Внаслідок стрімкого розвитку досліджень у галузі квантової фізики та квантової інформації протягом останніх десятиліть зросла потреба у вивченні фізичних моделей, які можуть ефективно реалізувати квантові обчислення. Однією з таких моделей є система двох спінів, які взаємодіють між собою через навколишнє середовище.

У цій роботі розглядається часова еволюція системи двох спінів, що взаємодіють між собою через бозонну ванну. Спочатку записується гамільтоніан системи, що складається з трьох членів, де перший, другий і третій члени відповідають системі, середовищу та взаємодії між системою і середовищем (у цьому конкретному випадку середовище є бозонним).

Після отримання матриці щільності обчислюється негативність, яка служить мірою запутаності системи. Виводяться аналітичні формули для власних значень, серед яких тільки одне виявилось від'ємним. Отже, негативність визначається абсолютним значенням цього власного значення. Відповідні графіки негативності будуються як функція часу, демонструючи вплив навколишнього середовища на запутаність системи в залежності від даних параметрів.

Авторський показчик

Holovatch Yu., 18

Romanczuk P., 18

Sakevarashvili A., 18

Sarkanych P., 18

Sevinchan Y., 18

Баумкетнер А., 24, 25

Блавацька В., 32

Богачов К., 13

Бутович Г., 19

Горбатенко Ю.В., 17

Гутак Т., 27

Демчук Т., 24, 25

Добуш О.А., 16

Дудка М., 32

Закревський О.О., 28

Ільницький Я., 19

Кедровський С., 33

Коваль Ю., 33

Ковальчук К.Г., 20

Козловський М.П., 16

Константинов О.М., 31

Копча М., 24, 25

Кордюк О.А., 13

Коропов О.В., 22

Кривчіков О.І., 17

Кузьмак А.Р., 34

Кузьмін С., 14

Кукаркін Н., 21

Кулінський В.Л., 14

Лахдеранта Е., 19

Літвінова С.С., 29

Мельник Р., 24, 25

Мельников Д., 33

Осокін Є.С., 15

Панас А.О., 23

Паримуда М., 30

Пацаган Т.М., 19, 21

Перепелиця С.М., 15

Пилюк І.В., 16

Плевачук Ю.О., 16

Пономарьов О., 33

Пономарьова С., 33

Саган В.В., 17

Скороход Р.В., 22

Сметана А.І., 34

Сотніков А.Г., 29

Стельмах А., 24, 25

Шаповал Д., 32

Шевченко С.І., 31

Якименко О.І., 20

XXV Всеукраїнська школа-семінар
молодих вчених
зі статистичної фізики
та теорії конденсованої речовини — 2025
Львів, 30–31 жовтня 2025 р.

Збірка тез

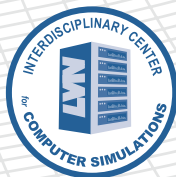
© Інститут фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України
Львів, 2025

Комп'ютерне макетування: Андрій Швайка

Укладання: Данило Добушовський

Графічний дизайн: Петро Сарканич

Організатори:



Підтримка:

