

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ



(1969–2009)

Львів - 2009

У 2009 році минає 100 років від дня народження одного з найвидатніших вчених сучасності – академіка Миколи Миколайовича Боголюбова. Людина надзвичайного математичного таланту, високого благородства, глибокої мудрості, простоти, скромності та раціональності. Микола Миколайович виховав і залишив людям велику і успішну когорту вчених – математиків, механіків та фізиків – як в Росії, так і в Україні. Наукові роботи Миколи Миколайовича, його ідеї та настанови стали наріжним каменем і плідним ґрунтом, на якому, зокрема, зародилась і виросла Львівська школа статистичної фізики.

З благословення цього великого вченого, за його підтримки і опіки у місті Львові у 1969 році створено Відділ статистичної теорії конденсованого стану київського Інституту теоретичної фізики АН УРСР, який береться за розвиток теорії електролітів і нового оригінального методу дослідження квантових багаточастинкових систем – методу зміщень і колективних змінних. Згодом цей відділ переростає у Львівське відділення "Статистична фізика", а ще пізніше – в Інститут фізики конденсованих систем АН України.

Можна дивуватись глибині взаєморозуміння між нами – львівськими теоретиками і Миколою Боголюбовим. Так, загально визнана згодом статистична теорія розчинів електролітів виросла із пропозиції М.М.Боголюбова об'єднати маєровські групові розвинення для потенціалів короткосяжної взаємодії із розрахунками далекосяжних кулонівських взаємодій, що проводилися нами в методі колективних змінних. Ця перша зустріч з М.М.Боголюбовим у середині 50-х років, який перебував тоді з візитом у Львові, тривала всього декілька хвилин. В результаті ми вперше побудували статистичну теорію розчинів електролітів, виходячи з перших принципів, врахувавши рівноправно електростатичні та короткосяжні взаємодії між усіма частинками розчину. А далі був метод зміщень і колективних змінних. І зовсім успішні роботи в застосуванні методу колективних змінних для розрахунку статистичної суми моделі Ізінга, і поширення цього методу на опис великої множини фізичних явищ, що супроводжують фазові переходи другого роду. В тісному контакті зі школою Боголюбова у Львові розвинулись також методи статистичної фізики нерівноважних процесів.

У 1990 році створено Інститут фізики конденсованих систем АН України. Двадцятирічний етап становлення Інституту не був легким. Нам випадало конкурувати з великими центрами теоретичної фізики в колишньому Радянському Союзі. Для виборювання свого місця під сонцем ми повинні були братися за складні, трудомісткі та найбільш актуальні задачі фізики конденсованого середовища. Щоб заявити про себе, ми мусили випереджати своїх візаві на півкроку, на крок. І це нам часто вдавалось. Це була гарна праця, вона приносила насолоду творення і пізнання нового. Основними науковими напрямками Інституту стали теорія рідин та розчинів, теорія фазових переходів і критичних явищ, теорія неупорядкованих систем, теорія нерівноважних процесів.

Простота взаєморозуміння, висока вимогливість до себе і своїх колег, стала традицією Інституту. Цікава і актуальна тематика приваблювали молодих і фізично сильних та здібних науковців, які приходили працювати в Інститут. Так зростав та міцнішав Інститут.

Нині я гордий за наш Інститут. Він став визнаним центром статистичної фізики, лідером у комп'ютерному моделюванні в Україні.

І у всьому цьому зростанні ми завжди залишаємося вірними боголюбівським ідеям і тій щирій дружбі, що панувала і продовжує бути такою у великій боголюбівській школі теоретичної фізики.



Почесний директор ІФКС НАН України
Академік НАН України
Ігор Юхновський,
Львів-Київ, 2009

Знаю Акад. АН УССР И.Р. Юхновского
как выдающегося специалиста в
области статистической физики
всегда поддерживаю предложения
об организации под его руководством
Института физики конденсированных сред
в г. Львове

19³/₈₁ 88

Акад. Н. Тютюнник



Глубокоуважаемый Борис Евгеньевич!

Рад Вам сообщить, что у меня складывается хорошее впечатление о работах украинских физиков, в частности Львовского отделения Института теоретической физики АН УССР в области физики твердого тела. В отделении получены принципиально важные результаты в теории фазовых переходов первого и второго рода, в многоэлектронной теории металлов, в теории оптических эффектов в многокомпонентных кристаллах. Интересной представляется также постановка задачи высокотемпературной сверхпроводимости. Отделение получило значительные ассигнования на выполнение исследований в этих областях.

Следует отметить также хорошую обеспеченность кадрами высшей квалификации.

Поэтому я со своей стороны поддерживаю инициативу Президиума Академии наук Украинской ССР о создании на базе этого отделения Института физики конденсированных систем АН УССР, что, безусловно, будет способствовать еще более активной работе львовских физиков.

Ю.А.Осипьян,

Академик-секретарь

Отделения физики АН СССР

КОРОТКИЙ ЛІТОПИС ІНСТИТУТУ

Квітень 1969 року	Створено відділ статистичної теорії конденсованих станів (СТеКС) Інституту теоретичної фізики АН УРСР – історично перший науковий підрозділ Інституту (завідувач І.Р.Юхновський).
Березень 1980 року	Створено Львівське відділення "Статистична фізика" Інституту теоретичної фізики АН УРСР у складі трьох наукових відділів: СТеКС (І.Р.Юхновський), теорії розчинів (М.Ф.Головко), квантової статистики (І.О.Вакарчук).
Вересень 1990 року	Створено Інститут фізики конденсованих систем (ІФКС) АН УРСР у складі семи відділів та трьох лабораторій. Засновник і перший директор Інституту – І.Р.Юхновський.
Вересень 1992 року	Започатковано проект UARNet – Українська академічна і дослідницька мережа, який згодом (1995 р.) дозволив створити окрему лабораторію інформаційних технологій та комп'ютерних мереж.
Лютий 1993 року	У рамках проекту UARNet здійснено перше в Україні підключення до мережі глобального Інтернету через некомутовані лінії зв'язку.
Липень 1993 року	Побачило світ перше число міжвідомчого збірника "Фізика конденсованих систем", який з грудня 1994 р. стає журналом "Condensed Matter Physics" і видається англійською мовою. З 1997 р. виходить щоквартально.
Травень 1995 року	Відкрито Спеціалізовану вчену раду при ІФКС НАН України із захисту докторських дисертацій. Нині Рада розглядає дисертації за трьома спеціальностями: 01.04.02 – теоретична фізика, 01.04.07 – фізика твердого тіла, 01.04.24 – фізика колоїдних систем (перша в Україні за цією спеціальністю).
Березень 1999 року	На базі лабораторії інформаційних технологій та комп'ютерних мереж створено Державне підприємство Науково-телекомунікаційний центр "Українська академічна і дослідницька мережа" ІФКС НАН України.

Травень 2000 року	Почала працювати новостворена Наукова рада НАН України з фізики рідкого стану, яка наприкінці 2004 року була реорганізована в Наукову раду з проблеми "Фізика м'якої речовини" при Відділенні фізики та астрономії НАН України; ІФКС НАН України визнано базовою установою Ради.
Грудень 2001 року	Запущено в дію перший в НАН України розрахунковий кластер Інституту (16 процесорів, робоча продуктивність 12,5 Гфлопс). Після модернізації у 2004, 2006 та 2008 рр. кластер залишається одним із найпотужніших в Україні (116 процесорних одиниць, пікова потужність – 1,3 Тфлопс).
Січень 2005 року	В Інституті відкрито філію кафедри інженерного матеріалознавства та прикладної фізики Національного університету "Львівська політехніка" (керівник філії І.М.Мриглод). З 2007 р. ІФКС НАН України входить до Науково-навчального центру з правами Відділення цільової підготовки Національного університету "Львівська політехніка" та Західного наукового центру НАН і МОН України.
Серпень 2005 року	Журнал "Condensed Matter Physics" включено до Філадельфійського списку та низки інших сервісів Томсонівського інституту наукової інформації (Thomson ISI).
Лютий 2007 року	Розрахунковий кластер ІФКС НАН України приєднано до GRID мережі академічних установ України.
Червень 2008 року	Журнал "Condensed Matter Physics" став першим науковим періодичним виданням, що за часи незалежності України отримало імпакт-фактор Томсонівського інституту наукової інформації.
Січень 2009 року	На спільному засіданні спеціалізованої ради Інституту та журі Університету Анрі Пуанкаре (Нансі, Франція) проведено перший міжнародний захист дисертації на одночасне присвоєння звання кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності "теоретична фізика" та звання доктора фізики і хімії Університету Анрі Пуанкаре.
Березень 2009 року	При Інституті створено філію кафедри прикладної математики Національного університету "Львівська політехніка" (керівник філії Т.М.Брик).

ІЗ КНИГИ ВІДГУКІВ

«З задоволенням в черговий раз відвідав Інститут фізики конденсованих систем НАН України і ще раз переконався, які прекрасні фахівці в ньому працюють, які важливі проблеми сучасної фізики ними вирішуються, яких вагомих результатів вони досягли. Хочу побажати Інституту процвітання, а всім його співробітникам подальших творчих досягнень, доброго здоров'я і щастя!»

Академік НАН України М.С.Бродин,
Академік-секретар Відділення фізики і астрономії НАН України,
Директор Інституту фізики НАН України;
4 березня 1998 року.

«It is always my pleasure to visit Lviv and the Institute, where excellent science and scientists have been produced. Please keep this tradition forever. »

Best regards,
Fumio Hirata,
IMS, Japan, 20/8/98

«З подивом слідкую, як із візії академіка Ігоря Юхновського виріс потужний, відомий і цінений у всьому світі, Інститут Фізики Конденсованих Систем НАН України у Львові.»

Олекса Біланюк,
іноземний член НАН України
Львів, 27.XI.1998

«Мушу засвідчити, що будь-яке відвідування ІФКС НАН України завжди і корисне, і приємне. Корисне тому, що співробітники Інституту працюють на світовому рівні, користуються визнанням і авторитетом у багатьох питаннях статистичної теорії фізики фазових перетворень, систем з сильною кореляцією, і у них багато чому можна навчитися. Приємне, бо кожного разу мене незмінно вражає висока взаємна вимогливість співробітників один до одного, що поєднана з теплими, майже сімейними, стосунками між собою і увагою до гостей...

З великою і щирою повагою до колективу ІФКС НАН України»
В.М.Локтєв, Академік-секретар Відділення фізики
і астрономії НАН України,
31 серпня 2005 р.

ОСНОВНІ НАПРЯМКИ ДІЯЛЬНОСТІ

Основними напрямками діяльності Інституту, що визначені Президією НАН України, є:

- ✓ Статистична теорія твердого тіла і м'якої речовини
- ✓ Комп'ютерне моделювання фізичних процесів і розрахунки основних фізичних характеристик конденсованих систем

Тематика наукових досліджень

Фундаментальні дослідження:

- Методи статистичної фізики і комп'ютерного моделювання
- Теорія рідин та розчинів
- Теорія фазових переходів і критичні явища
- Квантова теорія твердих тіл
- Нерівноважні процеси і явища переносу
- Теорія релятивістичних систем
- Фізика м'якої речовини
- Фізика поверхні та гетерогенний каталіз

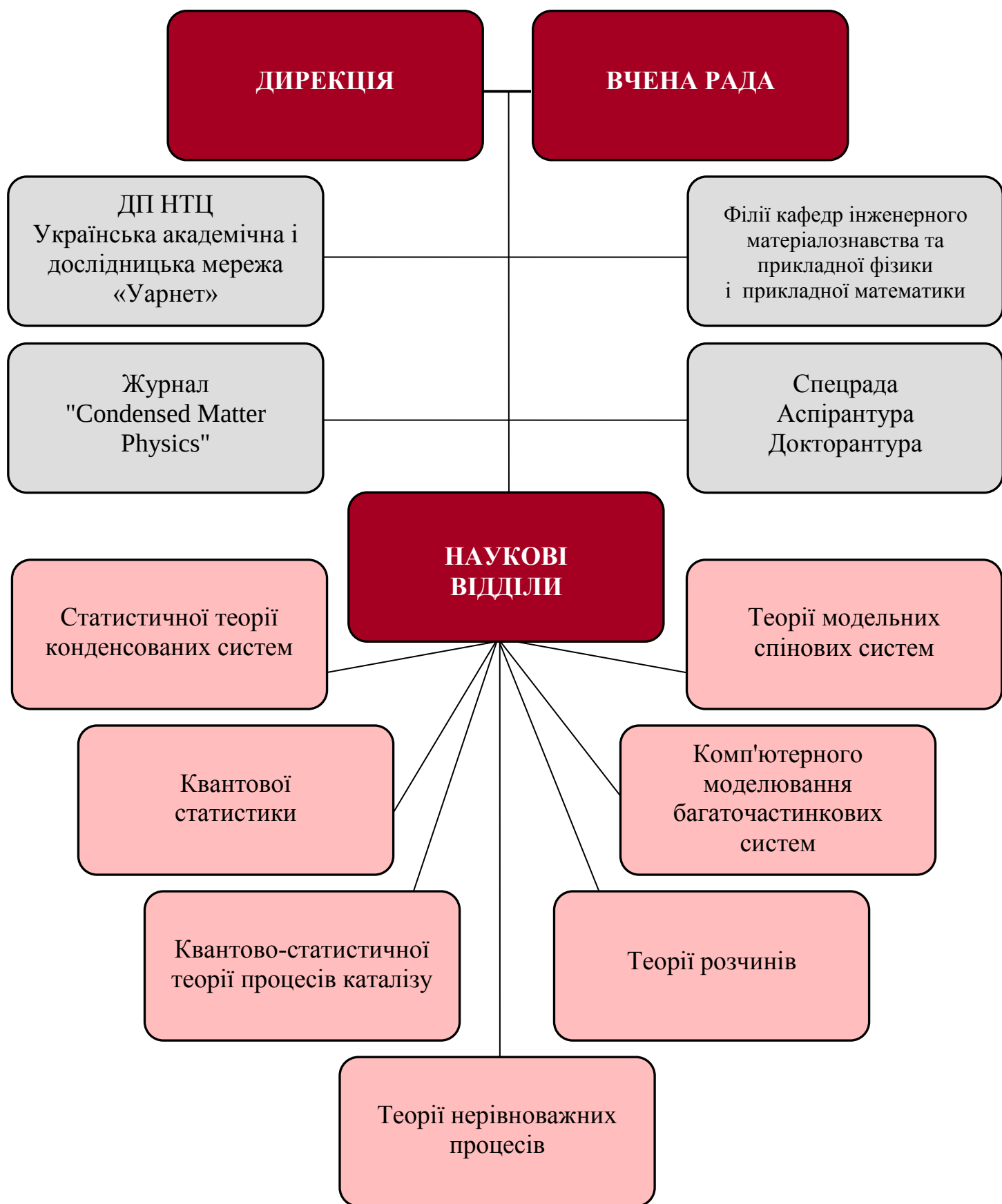
Прикладні дослідження:

- Фізико-хімічні властивості паливовмісних матеріалів об'єкту "Укриття"
- Теоретичні методи оптичного розпізнавання образів та захисту інформації
- Сучасні інформаційні та комп'ютерні технології в науці та освіті

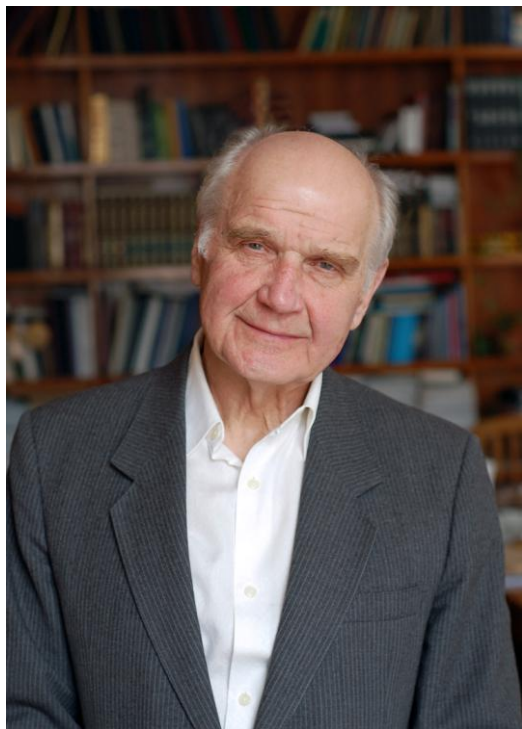
Форми науково-організаційної діяльності

- Підготовка кадрів вищої кваліфікації
- Видавнича діяльність
- Наукове співробітництво
- Конференції, наради, семінари
- Координація наукових досліджень

СТРУКТУРА ІНСТИТУТУ



ДИРЕКЦІЯ



Почесний директор – академік НАН України

Юхновський Ігор Рафаїлович

Народився 1 вересня 1925 р. на Рівненщині. Доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України, народний депутат України чотирьох скликань, лауреат премії АН УРСР ім. М.М.Крилова, кавалер орденів “Знак Пошани” (1975 р.), Трудового Червоного прапора (1985 р.), Вітчизняної війни I ступеня (1985 р.), Відзнаки Президента України (1995р.), “За заслуги” I ступеня (2000 р.), Князя Ярослава Мудрого V (2002 р.) та IV ступеня (2008 р.). У 2005 році І.Р.Юхновському Указом Президента України присвоєно звання Героя України із врученням ордена Держави.

Директор – член-кореспондент НАН України

Мриглюд Ігор Миронович

Народився 26 травня 1960 р. на Тернопільщині. У 1982р. з відзнакою закінчив фізичний факультет Львівського державного університету ім. І.Франка; кандидат фізико-математичних наук (1988 р.); доктор фізико-математичних наук з 2000 р.; член-кореспондент НАН України за спеціальністю “Фізика м’якої речовини, статистична фізика”, обраний у травні 2006 р. Завідувач відділу квантово-статистичної теорії процесів каталізу з 2002 р. Лауреат премії НАН України ім. С.І.Пекаря (2003 р.). Нагороджений Почесною грамотою Верховної Ради України (2004 р.) та відзнакою НАН України "За наукові досягнення" (2008р.). Автор біля 280 наукових праць, опублікованих у вітчизняних та зарубіжних виданнях. Посаду директора ІФКС НАН України обіймає з травня 2006 р.



Заступник директора з наукової роботи –

д.ф.-м.н. Брик Тарас Михайлович

Народився 31 липня 1963 р. у м. Дрогобич Львівської області. Закінчив із відзнакою фізичний факультет Львівського державного університету імені Івана Франка у 1985 р. У Львівському відділенні статистичної фізики ІТФ АН УРСР працює з 1987 р. Доктор фізико-математичних наук з 2005р., посаду заступника директора обіймає з 2006 р.

Тел. (032) 2701496; E-mail: bryk@icmp.lviv.ua



Заступник директора із загальних питань –

Пацаган Микола Іванович

Народився 15 листопада 1955 р. на Івано-Франківщині (с. Олеша Тлумацького району). Закінчив фізичний факультет Львівського державного університету імені Івана Франка (1978 р.). На посаді заступника директора працює з 2000 р.

Тел. (032) 2767786; E-mail: patsahan@icmp.lviv.ua

Вчений секретар – к.ф.-м.н. Мельник Роман Степанович

Народився 14 червня 1973 р. у м. Кам'янка-Бузька Львівської області. Випускник фізичного факультету Львівського державного університету імені Івана Франка (1995 р.). Аспірант ІФКС НАН України (1995-1998 рр.), кандидат фізико-математичних наук (2004 р.). На посаді вченого секретаря працює з 2006 р.

Тел. (032) 2761157; E-mail: romanr@icmp.lviv.ua



Головний бухгалтер – Беда Іоанна Петрівна

Народилася 3 липня 1949 р. у Львові. Закінчила економічний факультет Львівського державного університету імені Івана Франка в 1972 р. На посаді головного бухгалтера Інституту працює з 1992 р.

Тел. (032) 2761978; E-mail: Yana@icmp.lviv.ua

НАУКОВІ ВІДДІЛИ

ВІДДІЛ СТАТИСТИЧНОЇ ТЕОРІЇ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

Історично перший відділ Інституту. Створений у 1969 р. як відділ Інституту теоретичної фізики АН УРСР. З часу створення і до 2006 р. завідував відділом доктор фізико-математичних наук, академік НАН України Ігор Рафаїлович Юхновський. Нині відділ очолює Михайло Козловський. У відділі працюють: доктори фіз.-мат.наук Юрій Головач, Микола Кориневський і Михайло Шовгенюк; кандидати фіз.-мат.наук Тарас Крохмальський, Ігор Пилук, Микола Шпот, Зоряна Усатенко, Максим Дудка і Олександр Капікраниян; лаборант відділу Людмила Дідух; навчаються 2 аспіранти.



Завідувач відділу – проф. Михайло Павлович Козловський
Народився 30 серпня 1952 р. на Волині. Закінчив фізичний факультет Львівського державного університету (1973); кандидат фізико-математичних наук (1978), доктор фізико-математичних наук (1989); професор (2005). Область наукових інтересів – теорія фазових переходів та критичних явищ. Автор понад 200 наукових публікацій.

Тел. (032) 2760908; E-mail: mpk@icmp.lviv.ua

Тематика наукових досліджень

- розвиток аналітичних методів у теорії фазових переходів;
- розробка моделей опису фазових переходів;
- вивчення критичної поведінки просторово-обмежених систем та спінових моделей із домішками;
- дослідження властивостей квантових одновимірних спінових систем;
- розробка нових методів цифрової обробки оптичної інформації для прикладних задач.

Об'єкти досліджень: магнетики; сегнетоелектрики; полімери складної топології; напівобмежені системи; системи з протяжними домішками; складні системи; цифрова обробка оптичної інформації.

Наукова співпраця

Співробітниками відділу здійснюються спільні наукові дослідження із вченими українських і зарубіжних наукових установ, зокрема, із Університетом Йогана Кеплера (Лінц, Австрія), Університетом П'єра і Марії Кюрі (Париж, Франція), Університетом Анрі Пуанкаре (Нансі, Франція), Університетом м.Лейпціг (Німеччина), Інститутом фізики Щецінської політехніки (Польща).

Педагогічна діяльність

Співробітники відділу (Ю.В.Головач, М.П.Козловський, М.А.Кориневський, М.В.Шовгенюк) читають курси лекцій та керують дипломними і магістерськими роботами студентів Львівського національного університету імені Івана Франка, Національного університету “Львівська політехніка”, Українського католицького університету, Української академії друкарства. Провідні науковці відділу (Ю.В.Головач, М.П.Козловський, М.В.Шовгенюк) ведуть підготовку аспірантів. За останні 10 років у відділі захищено 6 кандидатських дисертацій (В.Б.Блавацька, М.Л.Дудка, Ю.М.Козловський, О.Є.Капикранян, Р.С.Мельник, О.О.Приюта).

Наукові публікації

За останні десять років співробітниками відділу опубліковано монографію *Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах*. Львів, Євросвіт, 2001, 592 с. (автори І.Р.Юхновський, М.П.Козловський, І.В.Пилик), посібник для вищих навчальних закладів *Задачі з фізики з розв'язками. Електромагнетизм*, Львів: НУ “Львівська політехніка”, 224 с. 2005 (автор М.А.Кориневський). Професор Ю.В.Головач здійснив редагування перших двох томів із серії *Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory* (World Scientific, Singapore. Vol. 1 – 2004; Vol. 2 – 2007).

За останні 10 років опубліковано більше ніж 500 наукових робіт, з них 237 – це статті в провідних наукових журналах. Результатом прикладних досліджень стало отримання більше 10 патентів України та США. Серед недавніх публікацій варто виділити:

1. O.V.Patsahan, M.P.Kozlovskii, R.S.Melnyk. Non-universal critical properties of a symmetrical binary fluid mixture // *Condens. Matter Phys.* 4 (2001) 235.
2. R.Folk, Yu.Holovatch, T.Yavors'kii. Critical exponents of a three-dimensional weakly diluted quenched Ising model // *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* 173 (2003) 175 [*Physics-Uspekhi* 46 (2003) 169].
3. Yu.M.Kozlovskii, M.V.Shovgenyuk. Optical image super-position in the fractional Fourier transform domain // *Proc. SPIE* 5477 (2004), 391.
4. N.A.Korynevskii, V.B.Solovyan. Ferroelectric - antiferroelectric mixed systems. Equation of state, thermodynamic functions // *Condens. Matter Phys.* 9 (2006) 187.
5. H.W.Diehl, D.Gruneberg, M.A.Shpot. Fluctuation-induced forces in periodic slabs: Breakdown of epsilon expansion at the bulk critical point and revised field theory // *Europhys. Lett.* 75 (2006) 241.
6. O.Derzhko, T.Krokhmal'skii, J.Stolze, G.Mueller. Dynamics of quantum spin chains and multi-fermion excitation continua // *Physica B* 378-380C (2006) 445.
7. Z.Usatenko. Adsorption of long-flexible polymer chains at planar surfaces: Scaling analysis and critical exponents // *J. Stat. Mech.: Theory and Experiment* (2006) P03009.
8. M.P.Kozlovskii, I.V.Pylyuk, O.O.Prytula. Free energy and equation of state of Ising-like magnet near the critical point // *Nucl. Phys. B.* 753 [FS] (2006) 242.
9. C. von Ferber, T.Holovatch, Yu.Holovatch, V.Palchykov. Network Harness: Metropolis Public Transport // *Physica A* 380 (2007) 585.
10. M.P.Kozlovskii. The correlation length of 3D Ising systems in the presence of an external field // *Phase transition* 80 (2007) 3.

ВІДДІЛ КВАНТОВОЇ СТАТИСТИКИ

Створений у березні 1980 р. Першим завідувачем відділу був професор Іван Вакарчук (до вересня 1984 р.). З березня 1986р. відділ очолює чл.-кор. НАН України, професор Ігор Васильович Стасюк. Відділ є одним із організаторів проведення періодичних міжнародних конференцій з фізики сегнетоелектриків. Нині у відділі працює 10 науковців: 1 доктор (Ігор Стасюк), 7 кандидатів наук (Роман Стеців, Андрій Швайка, Олег Величко, Петро Глушак, Тарас Мисакович, Орест Гера), 3 інженери-дослідники (Олег Воробйов, Володимир Краснов, Олег Матвєєв) та навчається 1 аспірант (Олег Менчишин).



Завідувач відділу – чл.-кор. НАН України Ігор Васильович Стасюк
Народився 23 вересня 1938 р. у м. Бережани Тернопільської області. Закінчив Львівський університет (1959); доктор фізико-математичних наук (1986), професор (1987), член-кореспондент НАН України (1995); завідувач відділу з 1986 р. Автор біля 500 праць у галузі теорії твердого тіла та статистичної теорії систем багатьох частинок. Основні напрямки досліджень: системи з сильними електронними кореляціями; фазові переходи у складних кристалах; сегнетоелектрики та молекулярні системи з водневими зв'язками; індуковані зовнішніми полями ефекти у кристалах; іонні (протонні) провідники.

Тел. (032) 2761161; E-mail: ista@icmp.lviv.ua

Тематика наукових досліджень

- розвиток аналітичних методів у теорії сильноскорельованих електронних систем; дослідження їх енергетичного спектру, термодинаміки та динаміки, явищ переносу;
- опис фазових переходів і ефектів бістабільності та дослідження динаміки кристалічних систем із локально-ангармонічними елементами структури;
- теорія явищ, пов'язаних з транспортом іонів, інтеркаляційними процесами та фазовими переходами до суперіонного стану в кристалах;
- моделювання фазових переходів типу лад-безлад та дослідження ефектів, зумовлених впливом зовнішніх полів (електричне поле, всесторонній тиск), у складних сегнетоелектричних кристалах;
- квантовохімічний опис комплексоутворення та адсорбції у водних розчинах та на поверхні модифікованих силікатів за участю радіонуклідних іонів.

Об'єкти досліджень: *сполуки з перехідними та рідкісноземельними елементами; системи зі змінною валентністю; високотемпературні надпровідники; іонні (суперіонні) провідники, інтеркальовані кристалічні структури; сегнетоелектрики з водневими зв'язками; радіонуклідні іони у водних розчинах та на поверхні адсорбентів.*

Наукова співпраця

У відділі виконуються спільні наукові дослідження із вченими інших установ і вищих навчальних закладів в Україні і за кордоном, в тому числі з дослідниками Національного університету “Львівська політехніка”, Дрогобицького державного педагогічного університету, Тернопільського національного технічного університету, Інституту експериментальної фізики Вроцлавського університету (проф. З.Чапля, Польща), фізичного факультету університету Джорджтауна (проф. Дж.Фрірікс, США), Центру лінійного прискорювача університету Стенфорда (проф. Т.Деверо, США), Інституту фізики м. Загреб (проф. В.Златіч, Хорватія). Підтримується тісне наукове співробітництво з науковими групами (проф. Б.Гільчер та проф. Я.Станковський) Інституту молекулярної фізики ПАН (Познань, Польща).

Педагогічна діяльність

Співробітники відділу (І.В.Стасюк, А.М.Швайка) читають курси лекцій та керують дипломними (магістерськими) роботами на фізичному факультеті Львівського національного університету імені Івана Франка; І.В.Стасюком підготовлено і читається спецкурс “Квантова статистична фізика” і “Теорія сильноскорельованих електронних систем”. Щорічно навчаються аспіранти під керівництвом І.В.Стасюка та А.М.Швайки. Протягом останніх десяти років у відділі захищено 6 кандидатських дисертацій (Н.І.Павленко, К.В.Табунщик, О.Д.Данилів, Т.С.Мисакович, О.В.Величко, О.Б.Гера).

Наукові публікації

За останні десять років співробітниками відділу опубліковано біля 400 наукових робіт, серед них 125 статей у вітчизняних і зарубіжних журналах. За згаданий період співробітники відділу взяли участь у 85 наукових конференціях. Серед недавніх публікацій можна виділити:

1. N.I.Pavlenko, I.V.Stasyuk. The effect of proton interactions on the conductivity behaviour in systems with superionic phases // J. Chem. Phys. 114 (2001) 4607.
2. I.V.Stasyuk, R.Ya.Stetsiv, Yu.V.Sizonenko. Dynamics of charge transfer along hydrogen bond // Condens. Matter Phys. 5 (2002) 685.
3. I.V.Stasyuk, T.S.Mysakovich. Susceptibility and phase transitions in the pseudospin-electron model at weak coupling // Acta Phys. Polon. 34 (2003) 765.
4. A.M.Shvaika. Dynamical mean-field theory of correlated hopping: A rigorous local approach // Phys. Rev. B. 67 (2003) 075101.
5. I.Stasyuk, Z.Czapla, S.Dacko, O.Velychko. Dielectric anomalies and phase transition in glycinium phosphite crystal under the influence of a transverse electric field // J. Phys.: Condens. Matter 16 (2004) 1963.
6. A.M.Shvaika, O.Vorobyov, J.K.Freericks, T.P.Devereaux. Resonant enhancement of inelastic light scattering in strongly correlated materials // Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 137402.
7. I.V.Stasyuk, O.V.Velychko. Theory of Rochelle salt: beyond the Mitsui model // Ferroelectrics 316 (2005) 51.
8. I.Stasyuk, Yu.Dublenych. Phase transitions and phase separations in an $S=1$ pseudospin-electron model: Application of the model to the intercalated crystals // Phys. Rev. B. 72 (2005) 224209.
9. I.V.Stasyuk, O.B.Hera. Mott transition in the asymmetric Hubbard model at half-filling within dynamical mean-field theory // Eur. Phys. J., 48 (2005), № 5, 339.
10. І.В.Стасюк, Р.Я.Стеців, І.М.Кріп, Т.С.Мисакович, В.О.Краснов. Адсорбція радіонуклідів на фероціанідах // Проблеми безпеки атомних електростанцій і Чорнобиля 7 (2007) 62.

ВІДДІЛ ТЕОРІЇ РОЗЧИНІВ



Створений у 1980 р. Очолює відділ з часу його створення чл.-кор. НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор Мирослав Головка. Нині тут працюють: три доктори наук (Мирослав Головка, Юрій Калюжний, Андрій Трохимчук), шість кандидатів наук (Максим Дручок, Едуард Вакарін, Тетяна Соколовська, Ігор Процикевич, Віталій Капко, Тарас Пацаган) та інженер-дослідник Юрій Блажиєвський.

Завідувач відділу – чл.-кор. НАН України Мирослав Федорович Головка

Народився 29 жовтня 1943 р. в селі Чернієві Івано-Франківського району Івано-Франківської області. Закінчив Івано-Франківський педагогічний інститут (1965) та аспірантуру Львівського університету (1969). У 1969-1990 рр. працював у Львівському відділі, а згодом відділенні Інституту теоретичної фізики АН УРСР, з 1990 р. – в Інституті фізики конденсованих НАН України. Кандидат фізико-математичних наук (1970), доктор фізико-математичних наук (1981), професор (1985), член-кореспондент НАН України (2003). Автор та співавтор близько 450 наукових робіт.

Тел. (032) 2760614; E-mail: holovko@icmp.lviv.ua



Тематика наукових досліджень

Тематика відділу охоплює широке коло об'єктів та проблем у теорії рідин та розчинів, фізиці м'якої речовини та фізиці поверхні. Серед них:

- розвиток аналітичних та числових методів статистичної фізики;
- моделювання ефектів сольватації та асоціації у розчинах електролітів та поліелектролітів;
- властивості складних та асоційованих рідин;
- міжколоїдні взаємодії та явище полідисперсності в колоїдних системах;
- адсорбція рідин у пористі середовища та міжфазні явища;
- корозійне та радіаційне руйнування матеріалів;
- внутрімолекулярний та міжмолекулярний електронний перенос у рідинах.

Об'єкти досліджень: розчини та розплави електролітів, полярні рідини, вода та водні розчини, розчини поліелектролітів та глобулярних протеїнів, самоасоційовані системи, макромолекулярні рідини, міцелярні розчини, мікроемульсії, полімерні розчини, колоїдні, колоїдно-полімерні системи та анізотропні флюїди, рідкокристалічні системи, просторово-обмежені системи, плівки, рідини в пористих середовищах.

Наукова співпраця

Відділ підтримує тісні наукові контакти з багатьма науковими установами. Серед них: Університет П'єра і Марії Кюрі (Париж, Франція, групи Ж.П.Бадіалі і Д. ді Капріо), Регенсбурзький університет (Німеччина, групи Г.Крінке і Й.Бартеля), Інститут хімічної фізики Польської АН (Варшава, Я.Стафей), факультет хімії і хімічної технології Люблянського університету (Словенія, група В.Влаші), Вища Нормальна школа в м. Ліоні (Франція, група В.Донга), Інститут молекулярних наук (Оказакі, Японія, група Ф.Хірати), Лабораторія термодинаміки ім. Е.Хала Інституту фундаментальних хімічних процесів Чеської АН (Прага, Чехія, група І.Незбеди), Факультет хімії і біохімії Університету Брігама Янга (США, група Д.Гендерсона), Інститут теоретичної фізики Віденського технічного університету (Австрія, Г.Каль), Іллінойський технологічний інститут (м.Чікаго, США, група Д.Васана), Окріджська національна лабораторія (США, групи П.Камінгса та А.Кялво), Ратгерський університет (Ньюарк, США, група П.Петров'яка), Санкт-Петербурзький політехнічний університет (Росія, група С.Шевкунова), Державний університет "Львівська політехніка" (група О.С.Заїченка).

Педагогічна діяльність

Співробітники відділу (М.Ф.Головко, Ю.В.Калюжний) читають курси лекцій та керують курсовими та дипломними роботами на фізичному факультеті Львівського національного університету імені Івана Франка. За останні 10 років захищено 5 кандидатських (Т.Г.Соколовська, В.І.Капко, Т.М.Пацаган, М.Ю.Дручок та С.П.Глушак) та 2 докторські (Ю.В.Калюжний, А.Д.Трохимчук) дисертації.

Наукові публікації

За останніх десять років співробітниками відділу опубліковано біля 200 статей у вітчизняних і зарубіжних журналах. Серед них:

1. A.Trokhymchuk, D.Henderson, A.Nikolov, D.T.Wasan. Computer simulation of macroion layering in a wedge film // *Langmuir* 21 (2005) 10240.
2. М.Ф.Головко, Ю.Л.Блажиевський. Вільна енергія іонної системи в іонному пористому середовищі // *Журн. фіз. досліджень* 10 (2006) 187.
3. E.V.Vakarin, J.P.Badiali. Maximum entropy approach to power-law distributions in coupled dynamic-stochastic systems // *Phys. Rev. E* 74 (2006) 036120.
4. Yu.V.Kalyuzhnyi, I.A.Protsykevych, P.T.Cummings. Thermodynamic properties and liquid-gas phase diagram of the dipolar hard-sphere fluid // *Europhys. Lett.* 80 (2007) 56002.
5. T.Patsahan, A.Taleb, J.Stafej, J.P.Badiali. Mapping between two models of etching process // *Condens. Matter Phys.* 10 (2007) 579.
6. S.P.Hlushak., Yu.V.Kalyuzhnyi, P.T.Cummings. Phase coexistence in polydisperse athermal polymer-colloidal mixture // *J. Chem. Phys.* 128 (2008) 154907.
7. M.Druchok, B.Hribar-Lee, H.Krienke, V.Vlachy. A molecular dynamics study of short-chain polyelectrolytes in explicit water: Towards the origin of ion-specific effects // *Chem. Phys. Lett.* 451 (2008) 281.
8. T.G.Sokolovska, R.O.Sokolovskii, G.N.Patey. Bridging the gap between phenomenology and microscopic theory: Asymptotes in nematic colloids // *Phys. Rev. E* 77 (2008) 041701.
9. J.M.Ilnytskyi, T.Patsahan, M.Holovko, P.Krouskop, M.Makowski. Morphological changes in block copolymer melts due to a variation of intramolecular branching. *Dissipative Particles Dynamics Study* // *Macromolecules* 41 (2008) 9904.
10. D.N. Le Bard, V.Kapko, D.V.Matyushov. Energetics and Kinetics of Primary Charge Separation in Bacterial Photosynthesis // *J. Phys. Chem. B* 112 (2008) 10322.

ВІДДІЛ ТЕОРІЇ НЕРІВНОВАЖНИХ ПРОЦЕСІВ

Створений у 1995 р. на базі лабораторії теорії нерівноважних процесів у рідинах та плазмі відділу теорії розчинів. Очолює відділ доктор фіз.-мат. наук, професор Михайло Токарчук. З часу свого створення відділ бере активну участь у дослідженнях за чорнобильською тематикою. У відділі працюють: 1 доктор наук (Михайло Токарчук), 5 кандидатів наук (Євген Сов'як, Ігор Омелян, Олександр Кобрин, Степан Глушак, Дмитро Портнягін), 3 інженери-дослідники (Юлія Черноморець, Юрій Дубленич, Андрій Василенко). В аспірантурі навчається Богдан Марків (науковий керівник М.В.Токарчук).



Завідувач відділу – проф. Михайло Васильович Токарчук

Народився 3 листопада 1956 р. у смт. Брошнів Івано-Франківської області. Закінчив Львівський університет (1980 р.). У 1986 р. захистив кандидатську дисертацію (науковий керівник проф. Д.М.Зубарєв), доктор фізико-математичних наук (1994 р.), професор (2000 р.), завідувач відділу з 1995 р. Лауреат премії НАН України ім. С.І.Пекаря (2003 р.). У 2006 р. нагороджений грамотою Верховної Ради України. Автор близько 200 наукових праць.

Тел.: (032) 2707401; E-mail: mtok@icmp.lviv.ua

Тематика наукових досліджень

- узгоджений опис кінетики та гідродинаміки густих газів, рідин та плазми;
- узагальнена гідродинаміка полярних і магнітних рідин та їх сумішей у зовнішніх полях;
- зворотньоосмотичні процеси переносу іонів та молекул розчину електроліту через мембранні структури, пористі середовища;
- реакційно-дифузійні процеси у просторово неоднорідних системах “газ – адсорбат – метал” та в системах “електроліт – пористий електрод” з врахуванням процесів інтеркаляції іонів у матрицю електрода;
- дослідження нерівноважних процесів у водних розчинах радіоактивних елементів: гідроліз, радіоліз, взаємодія паливомісних мас із водою;
- реакційно-дифузійна теорія міграції радіонуклідів у ґрунтах та ґрунтових водах, а також сорбції радіонуклідів фероціанідними сорбентами на глинистій матриці.

***Об’єкти досліджень:** прості, іонні, полярні та магнітні рідини, їх суміші; розчини електролітів у пористих середовищах; плазма; водні розчини електролітів радіоактивних елементів; паливовмісні матеріали.*

Наукова співпраця

Співробітники відділу виконують спільні наукові дослідження з працівниками інших наукових установ в Україні і за кордоном, зокрема з дослідниками з Національного університету “Львівська політехніка”. Встановлені і підтримуються добрі наукові контакти з вченими Інституту теоретичної фізики Лінцського університету (Австрія, група проф. Р.Фолька); Інституту проблем безпеки атомних електростанцій НАН України (група д. ф.-м. н. О.Жидкова); Московським державним інститутом радіотехніки, електроніки та автоматики (група проф. В.Морозова).

Педагогічна діяльність

М.В.Токарчук читає лекції студентам на кафедрі прикладної математики Національного університету “Львівська політехніка”.

Наукові публікації:

1. A.E.Kobryn, T.Hayashi, T.Arimitsu. Quantum stochastic differential equations for boson and fermion systems – method of non-equilibrium thermo field dynamics //Annals of Physics 308 (2003) 395.
2. E.Spohr, A.Trokhymchuk, E.Sovyak, D.Henderson, D.T.Wasan. Computer simulations of a monolayer of like-charged particles condensed on an oppositely-charged flat area // Mol. Simulations 29 (2003) 755.
3. Є.М.Сов'як. Вплив електростатичних взаємодій на йонну адсорбцію на контактні розчину електроліту з пористим середовищем // Журн. фіз. досліджень 7 (2003) 253.
4. I.P.Omelyan, I.M.Mryglod, R.Folk, and W.Fenz. Ising fluids in an external magnetic field: An integral equation approach // Phys. Rev. E 69 (2004) 061506.
5. I.P.Omelyan, I.M.Mryglod, M.V.Tokarchuk. Wavevector- and frequency-dependent shear viscosity of water: the modified collective mode approach and molecular dynamics calculations // Condens. Matter Phys., 8 (2005) 25.
6. I.Omelyan, F.Hirata, and A.Kovalenko. Criticality of a liquid–vapor interface from an inhomogeneous integral equation theory // Phys. Chem. Chem. Phys. 7 (2005) 4132.
7. Yu.I.Dublenych. Exact ground-state diagrams for the generalized Blume-Emery-Griffiths model // Phys. Rev. B 71 (2005) 012411.
8. A.E.Kobryn, T.Yamaguchi, F.Hirata. Study of anomalous mobility of polar molecular solutions by means of the site-site memory equation formalism // J. Molecular Liquids 125 (2006) 14.
9. V.V.Ignatyuk, M.V.Tokarchuk, P.P.Kostrobij. Quantum kinetic equations approach to the description of chemical reactions between adparticles at a metallic surface // Condens. Matter Phys. 9 (2006) 55.
10. I.P.Omelyan. Extrapolated gradientlike algorithms for molecular dynamics and celestial mechanics simulations // Phys. Rev. E 74 (2006) 036703.

ВІДДІЛ ТЕОРІЇ МОДЕЛЬНИХ СПІНОВИХ СИСТЕМ

Створений у 1995 р. Перший завідувач відділу – доктор фізико-математичних наук, проф. Роман Романович Левицький. З 2003 р. відділ очолює доктор фізико-математичних наук Олег Держко. Нині тут працюють 10 співробітників: 2 доктори наук (Роман Левицький, Олег Держко), 5 кандидатів наук (Сергій Сороков, Ярослав Щур, Остап Баран, Алла Моїна, Богдан Лісний), а також 2 інженери-дослідники (Андрій Андрусик, Андрій Вдович). В аспірантурі навчається Микола Максименко.



Завідувач відділу – д.ф.-м.н. Олег Володимирович Держко

Народився 1960 р. у Львові. У 1982 р. закінчив фізичний факультет Львівського державного університету ім. Івана Франка. У 1988 р. захистив кандидатську дисертацію "Статистична теорія частково збуджених систем", у 2004 р. – докторську дисертацію "Ефекти анізотропії, регулярної неоднорідності і випадкового безладу у низьковимірних спінових моделях". Область наукових інтересів – теорія конденсованих систем.

Тел.: (032) 2707439; E-mail: derzhko@icmp.lviv.ua

Тематика наукових досліджень

- теорія сегнетоелектриків із водневими зв'язками: фазові переходи і фізичні властивості, вплив зовнішніх полів;
- моделювання динаміки ґратки у складних сегнетоелектричних кристалах;
- розвиток аналітичних і чисельних методів у теорії класичних і квантових спінових моделей; врахування різних типів взаємодій і безладу; теорія спінового (протонного) скла; застосування у теорії сегнетоелектриків;
- теорія рідкокристалічних систем: аналітичні і числові методи.

***Об'єкти досліджень:** сегнетоелектрики, низьковимірні квантові спінові моделі, сильноскорельовані системи на геометрично фрустрованих ґратках.*

Наукова співпраця

Встановлені і підтримуються добрі наукові контакти з вченими Львівського національного університету імені Івана Франка (група проф. М.О.Романюка і проф. А.С.Волошиновського); Національного університету "Львівська політехніка" (доц. І.Р.Зачек); Ужгородського національного університету (група проф. О.Г.Сливки); Магдебурзького університету (Німеччина, група проф. Й.Ріхтера); Дортмундського університету (Німеччина, проф. Й.Штольце); Університету Британської Колумбії (Ванкувер, Канада, проф. Г.Н.Пейті); Інституту молекулярної фізики ПАН (Познань, групи проф. Я.Станковського і проф. З.Трибули).

Педагогічна діяльність

О.В.Держко читав лекції на кафедрі фізики конденсованих систем і кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка, а також у Національному університеті "Львівська політехніка". За останні 10 років у відділі захищено 5 кандидатських дисертацій (Р.О.Соколовський, А.П.Моїна, Т.М.Верхоляк, О.Р.Баран, О.В.Забуранний, Б.М.Лісний) та 1 докторську (О.В.Держко).

Наукові публікації:

За останні 10 років співробітниками відділу опубліковано понад 100 статей у вітчизняних та міжнародних наукових виданнях. Серед них:

1. R.R.Levitskii, B.M.Lisnii. Theory of related to shear strain u_6 physical properties of ferroelectrics and antiferroelectrics of the KH_2PO_4 family // Physica status solidi (b) 241 (2004) 1350.
2. T.G.Sokolovska, R.O.Sokolovskii, G.N.Patey. Surface-induced ordering of nematics in an external field: The strong influence of tilted walls // Phys. Rev. Lett. 92 (2004) 185508.
3. J.Richter, O.Derzhko, J.Schulenburg. Magnetic-field induced spin-Peierls instability in strongly frustrated quantum spin lattices // Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 107206.
4. A.P.Moina, R.R.Levitskii, I.R.Zachek. Piezoelectric resonance and sound attenuation in the Rochelle salt $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ // Phys. Rev. B 71 (2005) 134108.
5. O.Derzhko, T.Krokhmalskii, J.Stolze, G.Müller. Dimer and trimer fluctuations in the $s=1/2$ transverse XX chain // Phys. Rev. B 71 (2005) 104432.
6. Ya.Shchur. Lattice dynamics study and specific heat of CsH_2PO_4 and CsD_2PO_4 // Phys. Rev. B 74 (2006) 054301.
7. R.R.Levitskii, O.R.Barан, B.M.Lisnii. Phase diagrams of spin-1 Ising model with bilinear and quadrupolar interactions under magnetic field. Two-particle cluster approximation // Eur. Phys. J. B 50 (2006) 439.
8. O.Derzhko, J.Richter. Universal low-temperature behavior of frustrated quantum antiferromagnets in the vicinity of the saturation field // Eur. Phys. J. B 52 (2006) 23.
9. T.G.Sokolovska, R.O.Sokolovskii, G.N.Patey. Colloidal interactions in nematic fluids // Phys. Rev. E 73 (2006) 020701(R).
10. O.Derzhko, A.Honecker, J.Richter. Low-temperature thermodynamics for a flat-band ferromagnet: Rigorous versus numerical results // Phys. Rev. B 76 (2007) 144418.

ВІДДІЛ КВАНТОВО-СТАТИСТИЧНОЇ ТЕОРІЇ ПРОЦЕСІВ КАТАЛІЗУ



Верхоляк, Олесь Забуранний, Вікторія Блавацька), а також 4 дослідники (Йосип Гуменюк, В'ячеслав Купоров, Ірина Бзовська, Віталій Соколов). В аспірантурі навчається Ірина Бінас.

Завідувач відділу – чл.-кор. НАН України Ігор Миронович Мриглод

Очолює відділ з часу його створення. Коло наукових інтересів: теорія рідин, нерівноважні процеси, теорія фазових переходів, методи статистичної фізики і комп'ютерного моделювання, фізика хімічно-активних систем. Автор біля 280 наукових праць.

Тел.: (032) 2761157; E-mail: mryglod@icmp.lviv.ua



Тематика наукових досліджень

- розвиток квантово-статистичних підходів до опису процесів на поверхні;
- дослідження багатокомпонентних, зокрема хімічно-реагуючих, сумішей;
- розвиток методів комп'ютерного моделювання і комп'ютерний експеримент;
- дослідження гетероструктур і міжфазних властивостей;
- нерівноважні процеси, хімічна кінетика та моделювання явищ каталізу.

***Об'єкти досліджень:** суміші і розплави; іонні рідини; гетероструктури; низьковимірні і гранулярні магнетики; гетерогенний каталіз; поверхневі і динамічні явища.*

Наукова співпраця

Встановлені і підтримуються добрі наукові контакти з вченими Інституту теоретичної фізики Лінцького університету (Австрія, група проф. Рейнхарда Фолька); Лабораторією теоретичної фізики Університету Парі-Сюд (Франція, група проф. Жан-Мішеля Кайоля); Інституту фізичної хімії ПАН (Варшава, Польща, група проф. Аліни Цях); Університету П'єра і Марії Кюрі (група проф. Жан-П'єра Бадіалі); Інституту проблем безпеки атомних електростанцій НАН України (група д.ф.-м.н. Олександра Жидкова); Національного університету "Львівська політехніка" (групи проф. Петра Костробія та проф. Зінаїди Дусягіної); Московським державним інститутом радіотехніки, електроніки та автоматики (група проф. Володимира Морозова).

Педагогічна діяльність

Співробітники відділу (І.М.Мриглод, Н.І.Павленко, В.В.Ігнатюк) ведуть спецкурси і читають лекції для студентів Національного університету "Львівська політехніка", зокрема через філію кафедри інженерного матеріалознавства і прикладної фізики (керівник – І.М.Мриглод), що створена у 2005 р. Багато уваги приділяється роботі з аспірантами і молодими вченими.

Наукові публікації

З часу створення відділу у 2002 році опубліковано 130 статей у наукових журналах, 57 препринтів і авторефератів, 142 тези доповідей на наукових конференціях. Серед них:

1. I.Omelyan, I.Mryglod, R.Folk Symplectic analytically integrable decomposition algorithms: classification, derivation, and application to molecular dynamics, quantum and celestial mechanics simulations // Comp. Phys. Comm. 151 (2003) 272.
2. W.Fenz, R.Folk, I.M.Mryglod, I.P.Omelyan. Phase diagrams of classical spin fluids: The influence of an external magnetic field on the liquid-gas transition // Phys. Rev. E 68 (2003) 061510.
3. V.V.Ignatyuk, V.G.Morozov. Ultrafast dynamics of laser-pulse excited semiconductors: non-Markovian quantum kinetic equations with nonequilibrium correlations // Condens. Matter Phys. 7 (2004) 579.
4. I.P.Omelyan, W.Fenz, I.M.Mryglod, R.Folk. XY Spin fluid in an external magnetic field // Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 045701.
5. I.Mryglod, T.Bryk, V.Kuporov. Collective dynamics in ionic liquids: A comparative study with nonionic fluids. - In: Ionic Soft Matter: Modern Trends in Theory and Applications, NATO Science Series II, Eds. D.Henderson et al. / Springer: 206 (2005) 109.
6. O.Patsahan, I.Mryglod, J.-M.Caillol. Ionic liquids: charge and density correlations near gas-liquid criticality // J. Phys.: Cond. Matt. 17 (2005) L251.
7. І.М.Мриглод, І.П.Омелян, І.Р.Юхновський. Динаміка субмікронного пилу у повітряному середовищі: Чорнобильські аспекти // Укр. фіз. журн. 50 (2005) А52.
8. A.Ciach., O.Patsahan. Field-theoretic description of ionic crystallization in the restricted primitive model // Phys. Rev.E 74 (2006) 021508.
9. V.Blavatska, C. von Ferber, Yu.Holovatch. Entropy-induced separation of star polymers in porous media // Phys. Rev. E 74 (2006) 031801.
10. T.Verkholyak, A.Honecker, W.Brenig. Jordan-Wigner approach to the frustrated spin one-half XXZ chain // Eur. Phys. J. B 46 (2006) 283.
11. N.Pavlenko, T.Kopp. Interface controlled electronic charge inhomogeneities in correlated heterostructures // Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 187001.

ВІДДІЛ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ СИСТЕМ

Створений у 2007 р. на базі відділу теорії металів і сплавів, яким впродовж 14 років (1990-2004) керував професор Зіновій Олександрович Гурський. З 2007 р. відділ очолює доктор фіз.-мат наук Тарас Брик. Нині у складі відділу 10 працівників, серед яких 2 доктори (Тарас Брик, Володимир Третяк), 6 кандидатів наук (Аскольд Дувіряк, Володимир Солов'ян, Юрій Яремко, Ярослав Ільницький, Андрій Баумкетнер, Орест Притула) та 2 інженери-дослідники Олег Фаренюк і Андрій Лазар. В аспірантурі навчається Іван Клевець.



Завідувач відділу – д.ф.-м.н. Тарас Михайлович Брик

Наукову діяльність розпочав під керівництвом проф. З.О.Гурського, розробляв теорію першопринципних псевдопотенціалів, побудованих на базисі повністю ортогоналізованих плоских хвиль, що стало основою для кандидатської дисертації, захищеної у 1994 р. У 1997-1999 рр. стажувався у одного із засновників теорії псевдопотенціалів та першопринципних розрахунків проф. Леонарда Клейнмана (Остін, США), а у 2000-2002 рр. працював під керівництвом проф. Тоні Геймета (Х'юстон, США) над комп'ютерним моделюванням границь розділу фаз.

У 2005 р. захистив докторську дисертацію за темою "Мікроскопічна теорія кінетичних колективних збуджень та їх проявів у динаміці простих та бінарних рідин". Наукові праці стосуються моделювання методами класичної і першопринципної молекулярної динаміки та теорії колективних збуджень у неупорядкованих системах.

Тел. (032) 2701496; E-mail: bryk@icmp.lviv.ua.

Тематика наукових досліджень

- моделювання складних фізико-хімічних та біологічних систем за допомогою методів молекулярної динаміки та Монте-Карло;
- моделювання металічних та складних молекулярних систем на основі першопринципних методів (*ab initio*);
- теорія колективних явищ у неупорядкованих системах;
- фізико-хімічні процеси на границях розділу фаз;
- дослідження фундаментальних проблем прямих взаємодій в області релятивістичної фізики.

Об'єкти досліджень: рідкі метали та сплави, рідкі кристали, макромолекули та білки, склоподібні системи; молекулярні рідини; поверхні твердих тіл; границі розділу рідина/кристал.

Наукова співпраця

Виконуються спільні наукові дослідження із науковими групами Римського університету "La Sapienza" (Італія, група проф. Дж. Руокко), Університету Каліфорнії м.Сан-Дієго (США, група проф. Т.Геймета), Королівського технологічного інституту м. Стокгольм (Швеція, проф. А.Белоножко), Університету м. Потсдам (Німеччина, група проф. Д.Неєра), Університету Дарема (Великобританія, група проф. М.Вільсона).

Педагогічна діяльність

Співробітники відділу (Т.М.Брик, В.І.Третяк) читають курси лекцій та керують дипломними (магістерськими) роботами у Національному університеті "Львівська політехніка"; В.І.Третяк читає курси класичної механіки та електродинаміки, а Т.М.Брик підготував і читає курси "Квантова хімія" та "Комп'ютерне моделювання фізичних процесів".

Наукові публікації

За останні п'ять років співробітниками відділу опубліковано понад 70 статей у вітчизняних і зарубіжних журналах, 7 препринтів, 106 тез наукових конференцій, 2 автореферати дисертацій.

1. M.R.Wilson, J.M.Ilnytskyi, L.M.Stimson. Computer simulations of a liquid crystalline dendrimer in liquid crystalline solvents // J. Chem. Phys. 119 (2003) 3509.
2. Y.Yaremko. Radiation reaction, renormalization and conservation laws in six-dimensional classical electrodynamics // J. Phys. A: Math. and General 37 (2003) 1079.
3. T.Bryk, I.Mryglod. Collective excitations in molten NaCl and NaI: A theoretical generalized collective modes study // Phys. Rev. B 71 (2005) 132202.
4. E.J.Smith, T.Bryk, A.D.J.Haymet. Free energy of solvation of simple ions: Molecular-dynamics study of solvation of Cl^- and Na^+ in the ice/water interface // J. Chem. Phys. 123 (2005) 034706.
5. A.D.J.Haymet, T.Bryk, E.J.Smith. Solute Ions at Ice/Water Interface. – In: Ionic Soft Matter: Modern Trends in Theory and Applications, NATO Science Series / Springer: 206 (2005) 333.
6. T.Bryk, I.Mryglod. Collective dynamics in binary liquids: Spectra dependence on mass ratio // J. Phys.: Cond. Matt. 17 (2005) 413.
7. S.L.Bernstein, T.Wyttenbach, A.Baumketner, J.-E.Shea, G.Bitán, D.B.Teplow, M.T.Bowers. Amyloid β -protein: Monomer structure and early aggregation states of A β 42 and its Pro19 alloform // J. Amer. Chem. Soc. 127 (2005) 2075.
8. M.Friedel, A.Baumketner, J.-E.Shea. Effects of surface tethering on protein folding mechanisms // Proc. Nat. Acad. Sci. USA 103 (2006) 8396.
9. T.Bryk, I.M.Mryglod. Collective excitations in dynamics of liquids: A "toy" dynamical model for binary mixtures // Low Temp. Phys. 33 (2007) 790.
10. S.Cazzatto, T.Scopigno, T.Bryk, I.Mryglod, G.Ruocco. Crossover between hydrodynamic and kinetic modes in binary liquid alloys // Phys. Rev. B 77 (2008) 094204.

Державне підприємство Науково-телекомунікаційний центр "Українська академічна і дослідницька мережа" ІФКС НАН України



Створене у 1998 р. на базі Лабораторії інформаційних технологій і комп'ютерних мереж ІФКС НАН України. Самостійно працює на ринку інформаційних послуг з 1999 р. Скорочена назва – "УАРНЕТ" (аббревіатура англійських слів "Ukrainian Academic and Research Network").

Підприємство має значний досвід у галузі комп'ютерних мереж, цифрової передачі даних та Інтернет-технологій. Роботи із забезпечення доступу до мережі Інтернет проводить, починаючи з 1992 р. У 1993 р. "УАРНЕТ" з допомогою Шведської космічної корпорації задіяв свій власний супутниковий канал зв'язку. Це було перше в Україні пряме включення у глобальний Інтернет, здійснене співробітниками Інституту фізики конденсованих систем НАН України за ініціативи акад. НАН України І.Р.Юхновського.

Підприємство визнане переможцем конкурсів "Обличчя міста 2001", "Галицький Лицар 2002", "Гордий Львів 2008", "Лідер року 2008".

Директор – к.ф.-м.н. Ігор Андрійович Протікевич

Народився 8 лютого 1962 р. у м.Дрогобич Львівської області. Закінчив з відзнакою фізичний факультет Львівського національного університету імені Івана Франка (1984 р.), кандидат фізико-математичних наук за спеціальністю "Теоретична і математична фізика" (з 1989 р.), старший науковий співробітник (з 1995 р.).

У 1996-1999 рр. – заступник директора ІФКС НАН України із загальних питань, з 1999 р. – директор ДП НТЦ "УАРНЕТ".

Тел: (032) 2768401; E-mail: prots@icmp.lviv.ua.



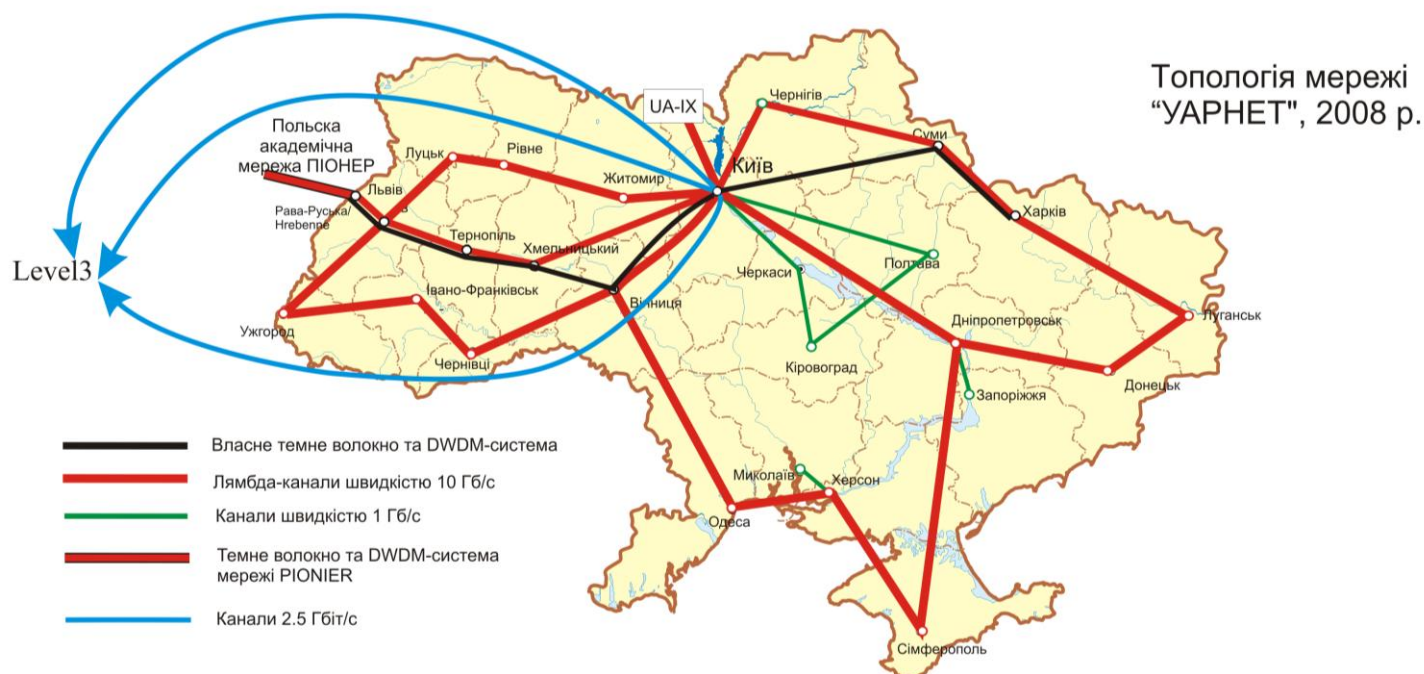
Сьогодні "УАРНЕТ" є одним із провідних провайдерів на ринку телекомунікацій України, який має свої:

- технічні майданчики у більшості обласних центрів України, що об'єднані між собою швидкісними каналами передачі даних (див.рис.);
- сім незалежних каналів доступу до глобальних інформаційних мереж загальною ємністю 14,5 Гб/с та 10-гігабітний канал до українських інформаційних мереж.

"УАРНЕТ" здійснює:

- весь спектр послуг мережі Інтернет, що полягає у якісному доступі як до глобальних, так і до українських інформаційних мереж із повним набором Інтернет-послуг (http, ftp, irc, icq, nntp, telnet...);
- реєстрування доменних імен у доменах .ua, .com.ua, .gov.ua, .org.ua;
- забезпечення різноманітних технічних варіантів доступу до мережі Інтернет: комутований та некомутований зв'язок, доступ з допомогою радіо-технологій, зв'язок через великі локальні мережі доступу (LAN, MAN), доступ через волоконно-оптичні лінії зв'язку.

В останні роки "УАРНЕТ" будує свою власну мережу передачі даних на основі оптоволоконних технологій та сучасного телекомунікаційного обладнання. Канали мережі "УАРНЕТ" забезпечують можливість розв'язання широкого спектру прикладних задач. Зокрема, дозволяють проведення наукових і освітніх відеоконференцій, застосування грид-технологій.



Загальна схема магістральних каналів мережі «УАРНЕТ».

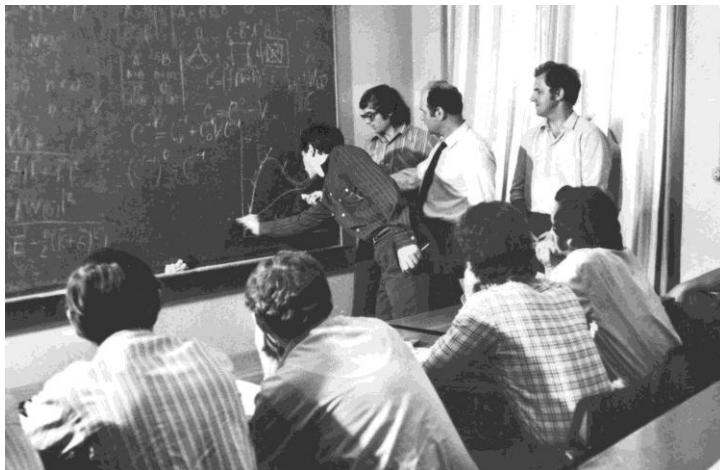
На підприємстві працює команда висококваліфікованих фахівців, спроможна реалізовувати різноманітні проекти в галузі інформаційних послуг. Вона забезпечує цілодобову технічну підтримку більш ніж 10 тисяч користувачів по всій території України. Мережа "УАРНЕТ" постійно розширюється та вдосконалюється. Велика увага приділяється надійності та якості надання послуг, інформаційній безпеці, захисту інформаційних ресурсів та впровадженню голосових і відеопослуг.

Послугами мережі "УАРНЕТ" користуються установи Національної академії наук України, органи вищої державної влади та місцевого самоврядування, університети, вищі і середні навчальні заклади, промислові підприємства, банківські структури, засоби масової інформації, інші провайдери Інтернету в усіх регіонах України.

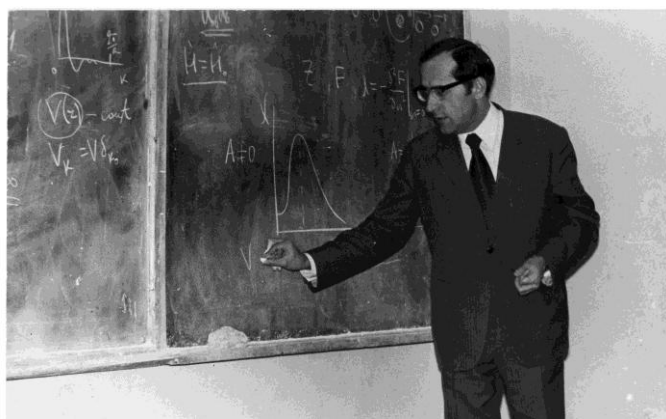
ОСНОВНІ НАУКОВІ РЕЗУЛЬТАТИ

Фундаментальні дослідження

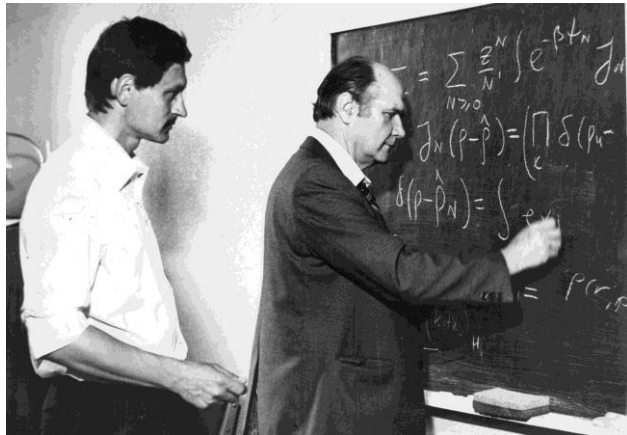
Профільним напрямком наукових досліджень ІФКС НАН України є розробка та розвиток аналітичних методів статистичної фізики та комп'ютерне моделювання фізико-хімічних процесів у твердих тілах та рідинах.



Починаючи зі створення у 1969 році Відділу статистичної теорії конденсованих станів ІТФ НАН України, у Львові формується наукова школа академіка Ігора Юхновського, здобутками якої є розробка методу колективних змінних (І.Р.Юхновський, І.О.Вакарчук, Ю.К.Рудавський, М.П.Козловський, І.М.Мриглод, Ю.В.Головач, І.М.Ідзик, М.А.Кориневський, О.В.Пацаган), побудова статистичної теорії іонно-молекулярних систем (І.Р.Юхновський, М.Ф.Головко, Ю.В.Калюжний, О.О.Пізіо, А.Д.Трохимчук), розвиток квантової теорії сильноскорельованих електронних, протонних та спінових систем (І.В.Стасюк, Р.Р.Левицький, О.В.Держко, А.М.Швайка), розробка методів нерівноважної статистичної фізики (М.В.Токарчук, І.М.Мриглод) та мікроскопічної теорії металів і сплавів (З.О.Гурський, М.В.Ваврух). З середини 1990-х років в ІФКС НАН України починає активно розвиватись новий напрям у статистичній фізиці – комп'ютерне моделювання рівноважних та динамічних властивостей рідин, полідисперсних систем, кристалів та стекл, біологічних систем (Т.М.Брик, І.П.Омелян, Я.Г.Чушак, А.Ф.Коваленко, Я.М.Ільницький, А.Б.Баумкетнер, Н.І.Павленко).



Метод колективних змінних. Львівська школа статистичної фізики широко відома в науковому світі насамперед через розробку методу колективних змінних для опису колективних ефектів у системах взаємодіючих частинок. Надзвичайно продуктивною була ідея виділення системи відліку шляхом усереднення функції переходу до колективних змінних за



короткосяжними взаємодіями. Запропонований підхід був застосований до опису іонно-дипольних систем, що стало початком побудови мікроскопічної теорії розчинів електролітів, що базується на рівноправному врахуванні всіх можливих взаємодій між іонами електроліту та молекулами розчинника.

Модифікація методу колективних змінних для його застосування до опису квантових систем взаємодіючих частинок є відома в науковій літературі як **метод зміщень і колективних змінних**. Основна ідея методу полягає у виділенні зі статистичного оператора частини, що характеризує взаємодію квантових хвильових пакетів частинок. Запропонований підхід виявився надзвичайно корисним для опису систем взаємодіючих бозе- та фермі-частинок.

Метод теоретичного опису фазових переходів. На основі методу колективних змінних запропоновано метод теоретичного опису фазових переходів та пов'язаних із ними критичних явищ для цілої низки задач статистичної фізики. В основі цього методу знаходиться запропонований І.Р.Юхновським оригінальний спосіб розрахунку статистичної суми тривимірної моделі Ізинга, що базується на ідеї про існування у фазовому просторі колективних змінних, середні значення яких пов'язані з параметром порядку. Саме це відкрило шлях до побудови на мікроскопічному рівні послідовної теорії фазових переходів, зокрема для таких об'єктів, як магнітні та сегнетоелектричні системи, окіл критичної точки рідина-газ, фазові переходи типу розшарування тощо. Побудовано узагальнення для великого канонічного розподілу.

Запропоновано метод розрахунку вільної енергії поблизу точки фазового переходу другого роду при наявності в системі зовнішнього поля. Вивчено вплив такого поля на поведінку фізичних характеристик системи (сприйнятливості, теплоємності, параметр порядку тощо) поблизу температури фазового переходу, досліджена їхня залежність від мікроскопічних параметрів. Сформульовано **метод розрахунку критичних показників** «звичайного» та «спеціального» фазових переходів у масивній теорії поля для тривимірних напівобмежених систем. Показано, що неупорядкованість поверхні не впливає на перебіг спеціального переходу, в той час як об'ємний безлад змінює критичні показники звичайного переходу. На основі оригінального підходу розраховано критичні показники точки Ліфшиця із довільною кількістю осей анізотропії; зроблено висновок, що показник анізотропії є неklasичним.

Багатогустинний формалізм. У рамках концепції асоціації у статистичній теорії рідкого стану розвинуто багатогустинний формалізм, який дозволив поширити методи теорії простих рідин на складні рідини. В такій схемі потенціали міжмолекулярної взаємодії розбиваються на три частини: короткосяжне відштовхування, що визначає структуру простих рідин; далекосяжні взаємодії, що мають електростатичну природу і визначають енергетичні властивості рідин; короткосяжні сильно притягальні взаємодії, відповідальні за утворення різноманітних асоціативних комплексів та кластерів. Теорія базується на діаграмній техніці та поєднанні розвинень за активністю і густиною для кореляційних функцій, що використовуються для опису, відповідно, асоціативних та неасоціативних взаємодій.

Для опису сильноскорельованих електронних систем – матеріалів та сполук, для яких непридатним є одноелектронний підхід – розвинено оригінальні підходи сильного зв'язку, що використовують техніку операторів Габбарда та діаграмні розклади для функцій Гріна. В рамках теорії динамічного середнього поля розроблено **нову аналітичну схему**, яка базується, з однієї сторони, **на апараті допоміжного фермі-поля** та методиці різночасових розщеплень, а з другої – **на підході твірного функціоналу**. На цій основі для моделей класу моделі Габбарда побудовано низку аналітичних наближень (в т. ч. узагальнення наближення Габбард - III), в рамках яких досліджено термодинаміку та особливості електронного спектру в області переходів метал-діелектрик та переходів із зміною валентності.

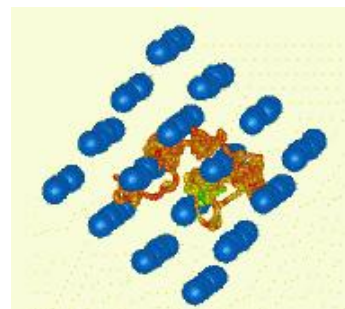
Розроблено **загальний підхід до отримання спектральних співвідношень для багаточасових кореляційних функцій**, у якому особлива увага звертається на розгляд неергодичних внесків. Отримано представлення багаточасових функцій Гріна через спектральні густини і розв'язано обернену задачу. З використанням цих спектральних співвідношень отримано загальні вирази, які пов'язують переріз непружного (комбінаційного) розсіяння електромагнітних хвиль із багаточасовими функціями Гріна і враховують усі внески – як нерезонансні, так і резонансні та змішані.

Метод узагальнених колективних мод. Запропоновано підхід узагальнених колективних мод у рамках статистичної гідродинаміки простих та багатокомпонентних рідин для дослідження колективної поведінки і узагальнених коефіцієнтів переносу. В рамках цього підходу часові кореляційні функції представляються у вигляді внесків із різними ваговими коефіцієнтами від власних динамічних мод системи, що описують релаксаційні та пропаторні процеси в рідині. Побудовано теорію негідродинамічних колективних збуджень у простих та багатокомпонентних рідинах, що дозволило вперше послідовно описати такі колективні процеси, як структурна релаксація, теплові хвилі та оптичні збудження фононного типу.

На основі ідей М.М.Боголюбова про скорочений опис нерівноважних процесів та методу нерівноважного статистичного оператора розвинуто **методику узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів** для густих газів, плазми та рідин. Запропоновано формулювання нерівноважної термодинаміки для квантово-польових систем. Запропоновано та реалізовано синтез методу нерівноважного статистичного оператора Зубарева та методу функцій Гріна для квантових просторово-неоднорідних електронних систем та показано зв'язок із часо-залежними теоріями функціоналу густини і функціоналу потоку густини.

Запропоновано **метод розрахунку електронної структури перехідних та рідкісно-земельних металів** на основі формалізму повністю ортогоналізованих плоских хвиль. У рамках такого підходу першопринципні псевдопотенціали представляються як лінійне перетворення вихідного кристалічного потенціалу на повному та ортонормованому наборі базисних функцій. Завдяки усуненню проблеми переповненості базисного набору ортогоналізованих плоских хвиль вдалось отримати першопринципні ПОПХ-псевдопотенціали, позбавлені недоліків, що характерні для більшості апріорних псевдопотенціалів.

Нові числові методи. В області розвитку нових числових методів у рамках підходу факторизації операторів еволюції проведена повна класифікація і послідовне виведення усіх явних декомпозиційних алгоритмів із кількістю експоненційних операторів до 11 включно. У результаті, додатково до 8 відомих раніше алгоритмів, знайдено 37 нових схем із точністю за часовим кроком від 2 до 6 порядків. Роглянуто застосування виведених алгоритмів для інтегрування рівнянь руху у класичних та квантових багаточастинкових системах. Показано, що ефективність деяких нових алгоритмів може бути на два порядки вищою у порівнянні з такими добре відомими інтеграторами як Верле, Фореста-Рутха, Сузукі, Лі тощо.



Розроблено **алгоритми інтегрування рівнянь руху полімерних рідкокристалічних систем** у методі молекулярної динаміки. Зокрема, узагальнено методи з використанням термостату та баростату в ансамблі з постійним тиском (компонентами тензора напружень) та температурою для системи сферичних та анізотричних частинок. Це дозволило ефективно описати внутрішню структуру та внутрімолекулярну динаміку низки складних полімерних рідких кристалів, зокрема гребінчастих та дендритних систем. Використовуючи такий підхід вдалося описати основні механізми експериментально спостережуваного явища фотоіндукованих деформацій в азобензинових плівках, що спричинені процесом фотоізомеризації.

Теорія рідин та розчинів

Такі дослідження розпочались у 60-70-х роках і були спрямовані на побудову мікроскопічної теорії розчинів електролітів, що базувалася на рівноправному врахуванні усіх взаємодій між частинками розчину. В побудованій у такий спосіб теорії, завдяки явному врахуванню взаємодій іонів із молекулами розчинника, стало можливим кількісно описати і дослідити явища екранування, іонної сольватації та їх залежності від іонної концентрації та інших параметрів розчину, а також описати інші важливі властивості та явища, зумовлені природою розчинника. В основу досліджень були покладені високоточні розвинення для вільної енергії та бінарних функцій розподілу іонно-молекулярних систем. Пізніше ці методи були використані також для дослідження сольових та метало-сольових розплавів (І.Р.Юхновський, М.Ф.Головко, В.С.Височанський, І.Й.Куриляк, Є.М.Сов'як, А.В.Попов, О.О.Пізіо, А.Д.Трохимчук, І.А.Процикевич).



На даний час дослідження у галузі теорії рідин та розчинів охоплюють широке коло об'єктів та задач фізики рідкого стану з використанням як оригінальних, так і відомих статистико-механічних методів (М.Ф.Головко, Ю.В.Калюжний, А.Ф.Коваленко, Ю.Я.Дуда, Е.В.Вакарін, Т.Г.Соколовська, В.І.Капко, М.Ю.Дручок, Т.М.Пацаган). Серед них техніка багатогустинного формалізму в теорії асоціативних рідин, застосування якої дало змогу узагальнити методики, що використовуються у теорії простих рідин, на складні рідини, такі як полімерні та сіткоутворюючі рідини, самоасоційовані рідини тощо.

У **теорії розчинів електролітів** використання багатогустинного формалізму дало змогу узагальнити результати, отримані раніше для розчинів електролітів у сильнополярних розчинниках, на випадок розчинів електролітів у полярних та слабополярних розчинниках. Зокрема, отримані в рамках асоціативного середньосферичного наближення аналітичні вирази для вільної енергії іонних та іонно-дипольних систем покладено в основу опису термодинамічних, кінетичних та діелектричних властивостей неводних розчинів електролітів. Ці результати використані для опису та інтерпретації експериментальних даних щодо осмотичних коефіцієнтів та електропровідності розчинів електролітів у розчинниках з достатньо низьким значенням діелектричної проникності. Розвинута теорія застосована також при дослідженні впливу електролітів на реакції внутрімолекулярного електронного переносу в слабополярних розчинниках. Показано, що утворення специфічних іонних пар між зарядженим донором або акцептором молекули і відповідним контріоном у слабополярних розчинах

електролітів спричиняє падіння на кілька порядків величини електронного переносу в області відносно малих іонних концентрацій. Теоретичні передбачення впливу електроліту на залежність внутрімолекулярного електронного переносу від іонної концентрації та донорно-акцепторної відстані підтверджені експериментально методами пульсуючого радіолізу та лазерного фотолізу на реакціях перестановки заряду та фотоіндукованого зарядового розділення у донорно-акцепторних сполуках, синтезованих та досліджених у Ратгерському університеті (США). Асоціативна концепція використана для інтерпретації експериментальних даних для діелектричних властивостей водних розчинів солей азотної та мурашиної кислот, отриманих в Інституті фізичної хімії Російської АН. Проведено систематичні дослідження впливу валентності катіона на структуру його гідратної оболонки. Виявлено ефект втрати певної кількості атомів водню, що інтерпретується як ефект катіонного гідролізу. Показано, що зі збільшенням валентності катіонів зростає стабільність їх гідратаційних структур, що мають форму шести атомів кисню, які октаедрично оточують катіон. Така стабільність гідратних структур приводить до появи нових частот, обумовлених поєднанням вібраційних осциляцій гідратної структури з лібраційними рухами молекул води, координованих катіонами, що підтверджено експериментально у дослідженнях із раманівської спектроскопії. З'ясовано, що катіонний гідроліз може вести до виникнення поліядерних іонних комплексів, поява яких суттєво впливає на термодинамічні та інші властивості розчинів, включаючи область безмежно малих іонних концентрацій.

У **теорії асоціативних рідин** методом багатогустинного формалізму проведено дослідження впливу димеризаційних, полімеризаційних та сіткоподібних кластерів на властивості рідин. Показано, що ефекти поляризації та сіткоутворення проявляються у зміні форми структурного фактора системи і появі додаткового максимуму в короткохвильовій області, що сигналізує про виникнення мезоскопічного впорядкування. У системі сіткоутворюючих плинів виявлено критичну точку «рідина-газ», що виникає навіть за відсутності центрально-симетричної притягальної взаємодії. Показано, що область рідкої фази є частиною перколяційної області, в якій розміри сіткового кластеру стають безмежними. При зростанні асиметрії інтенсивності поздовжньої та поперечної сіткоутворюючих взаємодій показано, що величини критичних температури та густини зменшуються. Для опису впливу кластероутворення на електронну структуру хімічно реагуючих рідин розвинуто метод інтегральних рівнянь для конфігураційно усереднених функцій Гріна. На прикладі простої моделі лужних металів показано, що в результаті димеризації провідна атомна рідина переходить у непровідну молекулярну рідину.

Розвинуто **теорію молекулярних та макромолекулярних рідин**, в основу якої покладено техніку багатогустинного формалізму в границі повної асоціації. Показано, що у випадку двоатомних рідин розвинутий підхід зводиться до теорії Чандлера-Силбі-Ладані. Проведено систематичні дослідження рівноважних властивостей макромолекулярних рідин, що складаються із гомо- та гетероядерних ланцюгових, зіркових та кільцевих молекул. За допомогою часткового усереднення вихідного шестимірного рівняння Орнштейна-Церніке для центральної молекули в молекулярному розчиннику отримано тривимірне узагальнення моделі базисних силових центрів, яке використано для опису гідратної структури молекул та іонів, молекулярних сурфактантів, а також конформаційних форм метенкефаліну.



Для **анізотропних рідин** сформульовано умови стійкості рівноважних систем зі спонтанним порушенням симетрії, встановлено їх зв'язок із виникненням голдстоунівських мод при відсутності зовнішнього поля. Розвинута техніка інтегральних рівнянь використана для опису анізотропних рідин із частково замороженими орієнтаційними ступенями вільності. Виявлено, що при спонтанному впорядкуванні в таких системах гармоніки кореляційних функцій, перпендикулярні до напрямку поля та напрямку директора, мають далекосяжний характер. Показано, що розорієнтуюче поле значно збільшує область впорядкованої фази, міняючи при високих температурах тип фазового переходу. Передбачено значне збільшення еластичності системи за рахунок розорієнтуючого поля.

Для **води та водних розчинів** проведено дослідження термодинамічних та структурних властивостей. Використана модель явно враховує утворення сітки водневих зв'язків між молекулами води, а розвинута на їх основі теорія правильно відтворює криву співіснування рідина-газ для води, передбачає такі її аномальні властивості як наявність максимуму на залежності густини від температури при нормальних тисках, а також добре відтворює температурні залежності ізотермічної стисливості, коефіцієнта термічного розширення і теплоємності води. Іонно-молекулярний підхід у теорії розчинів електролітів узагальнено на водні розчини олігоелектролітів. Запропоновано пояснення особливостей термодинамічних властивостей (осмотичних коефіцієнтів, ентальпії розведення тощо), які спостерігаються на експерименті і раніше не могли бути описані в рамках традиційних теоретичних підходів.

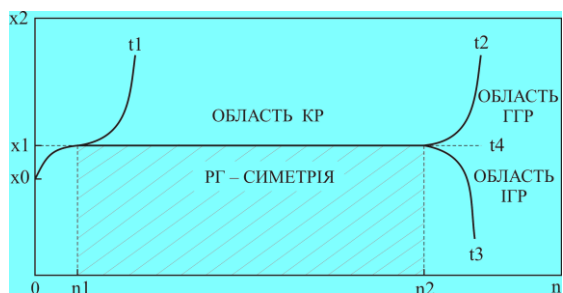
Запропоновано теоретичний опис каталітичних ефектів комплексоутворення у розчинах електролітів, зумовлених додаванням до розчину поліелектроліту. Запропоновано модель димеризації полііонів, у рамках якої отримано інтерпретацію експериментальних даних із рівноваги Донана для низки розчинів протеїнів.

Теорія фазових переходів і критичні явища

Розробка теорії фазових переходів та критичних явищ розпочалася у середині 80-х років минулого століття з ініціативи І.Р.Юхновського. Розвинутий ним метод колективних змінних до опису спінових систем відкрив шлях до побудови послідовної мікроскопічної теорії фазових переходів для низки фізичних систем. Серед них магнітні та сегнетоелектричні системи, окіл критичної точки рідина-газ, фазові переходи типу розшарування та ряд інших об'єктів (І.Р.Юхновський, І.О.Вакарчук, Ю.К.Рудавський, М.П.Козловський, І.М.Мриглод, І.В.Стасюк, М.А.Кориневський, О.В.Пацаган, І.В.Пилук).

Цікаві результати отримані в останні 10 років у теорії критичних явищ із використанням теоретико-польових підходів (Ю.В.Головач, М.А.Шпот, З.Є.Усатенко, М.Л.Дудка, В.Б.Блавацька).

Мікроскопічна теорія фазових переходів. Побудована мікроскопічна теорія фазових переходів для магнетика з однокомпонентним параметром порядку. Для тривимірної моделі Ізинга вивчено критичну поведінку часткових моделей ρ^{2m} ($m = 2, 3, 4, 5$), що описують фазовий перехід другого роду. З врахуванням конфлуентних поправок, виходячи з перших принципів, розраховано всі термодинамічні характеристики тривимірної ізингоподібної системи. Знайдено мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау та запропоновано метод отримання рівняння стану для системи поблизу точки фазового переходу. Досліджено вплив величини радіуса дії експонентно спадного потенціалу взаємодії на температуру фазового переходу, розмір критичної області, поведінку термодинамічних функцій.



Теорія фазових переходів Юхновського узагальнена на **випадок наявності зовнішнього поля**. Розвинутий теоретичний підхід дає змогу дослідити поблизу точки фазового переходу залежності термодинамічних характеристик тривимірних статистичних моделей як від температури та зовнішнього поля, так і від мікроскопічних параметрів системи (постійна ґратки та параметри потенціалу взаємодії). Вперше запропоноване рівняння стану для тривимірної ізинґоподібної системи, отримано явний вигляд скейлінгової функції. Показано, що в граничних випадках великих та малих значень поля це рівняння переходить у загальновідомі вирази.

Знайдено явні аналітичні вирази для термодинамічних функцій **класичної n-компонентної моделі магнетика** у тривимірному просторі. Досліджено залежність критичних амплітуд основних термодинамічних характеристик від приведеної температури та мікроскопічних параметрів системи у високо- та низькотемпературній фазах. Окремо розглянуто випадки значень параметра $n=1,2,3$, що характеризує компонентність спіна. Описано механізм формування піку теплоємності поблизу T_c для класичної моделі Гайзенберґа та знайдено залежність його величини від мікроскопічних параметрів.

Розвинуто мікроскопічний підхід до опису фазових переходів у **багатокомпонентних неперервних системах**. Запропонована теорія базується на методі колективних змінних з виділеною системою відліку. Отримано явний вигляд мікроскопічного гамільтоніану Гінзбурґа-Ландау-Вільсона в околі точки фазового переходу для двокомпонентної неперервної системи. Детально досліджено проблему визначення параметра порядку бінарної флюїдної суміші. Отримано явні вирази для термодинамічних функцій та рівняння стану у випадку симетричної бінарної суміші в околі критичної точки рідина-газ.

Безлад і критичність у магнетиках. Досліджено явища, що відбуваються в околі точки Кюрі під впливом структурного безладу. Передбачено зміну критичної поведінки магнетиків під впливом різних типів безладу (безлад заміщення, випадкова анізотропія, фрустрації) та отримано кількісні характеристики цієї поведінки. Доведено наявність спонтанного параметра порядку в двовимірних системах скінченного розміру з неперервною симетрією. Досліджено квазі-далекосяжне впорядкування, що відбувається у таких системах у термодинамічній границі.

Досліджено залежність ефективних критичних показників m-векторних магнетиків із протяжними домішками від параметра потоку ренормалізаційної групи, що пов'язаний із відстанню до критичної температури. Встановлено, що навіть слабе розведення ізинґівського магнетика домішками у вигляді паралельних ліній приводить до швидшого переходу у новий клас універсальності, ніж домішки у вигляді точкового безладу. В рамках загального термодинамічного формалізму доведено, що це фазові переходи другого роду.

У системах із **термодинамічними в'язями** встановлено наявність принципово нових поправок до скейлінгу, які пропорційні до критичного показника теплоємності α у системі без в'язі. Крім відомого перенормування асимптотичних критичних показників (перенормувань Фішера) у таких системах виникають поправки, які є домінуючими при виході з критичної області і визначають специфіку поведінки систем із в'язями. Врахування нових поправок до скейлінгу дозволило усунути суперечності, які спостерігалися при комп'ютерному розрахунку критичних показників для ряду систем.

Скейлінг полімерів складної топології. Запропоновано теоретичний опис скейлінгових властивостей багатосортних полімерних сіток та зірок. Отримані результати знайшли застосування при побудові фазових діаграм для полімерів складної топології, дослідженні взаємодії між полімерами у доброму розчиннику, описі реакцій каталізу поблизу полімерних макромолекул, описі структурних переходів у молекулах ДНК.

Складні мережі. Застосовуючи підхід, що базується на теорії складних мереж, показано, що мережі громадського транспорту є безмасштабними тісними світами. Запропоновано модель, що описує скейлінгові властивості таких мереж та проаналізовано їх стійкість до випадкових пошкоджень і спрямованих атак.

В анізотропних та просторово обмежених системах для моделей із конкуруючими обмінними взаємодіями отримано перші нетривіальні порядки $1/N$ -розкладів для кореляційних критичних показників у m -вісних точках Ліфшица. Зроблено нові висновки стосовно якісної поведінки цих показників при зміні вимірності простору. Розраховано неklasичні поверхневі показники звичайного переходу у таких системах. Проведено числові оцінки для амплітуд Казимира у тривимірному просторі. Досліджено поверхневу критичну поведінку в напівобмежених n -компонентних системах за наявності кубічної анізотропії ($m=1$) при звичайному фазовому переході.

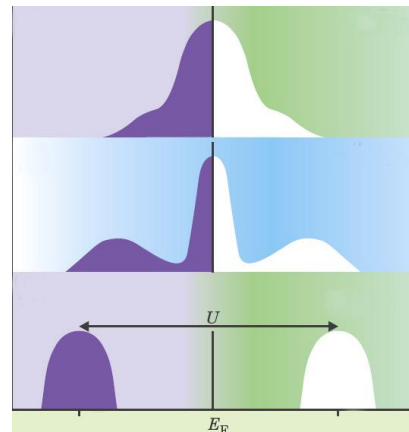
Досліджено термодинамічні та структурні характеристики **змішаних сегнето- та антисегнетоелектричних систем**. На основі оригінальної моделі у кластерному наближенні з врахуванням нерівноважного розподілу елементів структури, що впорядковуються, отримано фазові діаграми «температура-концентрація». Доведено, що сегнето- і антисегнетоелектрична фази існують лише відокремлено. Знайдено порогові значення концентрації компонент, при досягненні яких впорядкований стан кожного типу зникає – точка перколяції. Запропонована теорія дає пояснення експериментально спостережуваним властивостям твердих сумішей сегнетоелектричних систем.

Квантова теорія твердих тіл

Дослідження у галузі теорії твердих тіл проводяться в Інституті з 70-80-х років і початково були спрямовані на побудову теорії фазових переходів та опис фізичних явищ у сегнетоелектричних матеріалах на основі мікроскопічних моделей у рамках підходів, що ґрунтуються на базисному врахуванні короткосяжних взаємодій та формалізмі операторів Габбарда (Р.Р.Левицький, І.В.Стасюк). Важливим здобутком став розвиток мікроскопічної теорії індукованих оптичних ефектів у діелектричних кристалах (електро- і п'єзооптичний ефекти, електро- і п'єзогірація, магнітооптичний ефект), на основі якої було описано та передбачено характер аномалій оптичних характеристик в околі точок структурних і сегнетоелектричних фазових переходів (І.В.Стасюк, С.С.Коцур, Р.Я.Стеців, О.Л.Іванків).

Подальші дослідження охоплюють коло проблем, що пов'язані з мікроскопічним описом фазових переходів та фізичних ефектів, зумовлених сильними квантовими кореляціями частинок, в електронних системах із переходами «метал-діелектрик» і змінною валентністю, високотемпературних надпровідників, кристалічних і молекулярних системах із водневими зв'язками, сегнетоелектриках, магнетиках, іонних провідниках та інтеркальованих кристалічних структурах (І.В.Стасюк, А.М.Швайка, Р.Р.Левицький, О.В.Держко, Т.Є.Крохмальський, Т.М.Верхоляк, Н.І.Павленко, А.П.Моїна, Я.Й.Щур, О.В.Величко, Т.С.Мисакович).

У теорії сильноскорельованих електронних систем досліджено умови появи фазових переходів першого та другого роду між однорідними та модульованими фазами, фазового розшарування, переходу до надпровідного стану та нестійкостей сегнетоелектричного типу у сполуках із зонними та локалізованими електронними станами. На основі одно- та двопідграткової псевдоспін-електронних моделей описано фазові переходи до іншої однорідної фази, фази з подвійною модуляцією періоду ґратки та неспівмірної фази, а також явище бістабільності



структури в залежності від значення хімічного потенціалу електронів, асиметрії локальних ангармонічних потенціалів та температури. Побудовано фазові діаграми при різних густинах електронних станів у зоні провідності. Показано, що збільшення величини поперечного поля (пов'язаного з розщепленням тунельного типу) приводить до пониження температури переходу та зникненням фазових переходів у неспівмірну фазу. Встановлено, що при достатньо великому полі залишається лише перехід у фазу з подвійною модуляцією ґратки.

У рамках теорії динамічного середнього поля розроблено оригінальні підходи діаграмних розкладів, різночасових розщеплень та твірного потенціалу, які дозволяють будувати послідовні наближені розв'язки – як у рамках теорії збурень, так і непертурбативні. Для систем із корельованим переносом запропоновано загальну схему побудови рівнянь теорії динамічного поля. Досліджено особливості одноелектронних та бозонних спектрів і вивчено перехід метал-діелектрик для асиметричної моделі Габбарда.

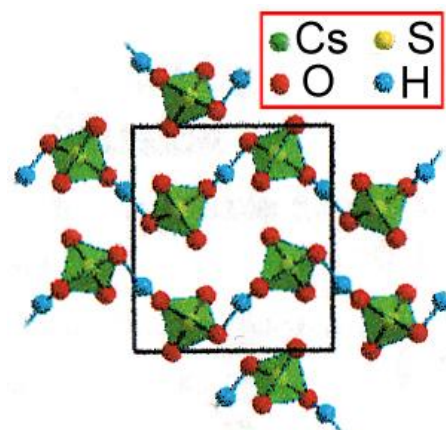
Для моделі Фалікова-Кімбала знайдено точні розв'язки для динамічних сприйнятливостей, досліджено прояви термічно активованих станів зарядово-впорядкованої фази у спектрах оптичної провідності, а також у транспортних властивостях: статичній та динамічній електро- та теплопровідності. Розвинено мікроскопічну схему для опису комбінаційного розсіяння світла та непружного розсіяння Х-променів на електронних збудженнях. Із використанням методу динамічного середнього поля отримано точні розв'язки для моделі Фалікова-Кімбала. Досліджено особливості прояву резонансних ефектів у електронному комбінаційному розсіянні поблизу переходу метал-діелектрик.

У теорії переносу заряду в іонних провідниках та кристалах із суперіонними фазами
запроваджено двостадійну орієнтаційно-тунельну модель протонного транспорту в ланцюжкових молекулярних системах із водневими зв'язками, що враховує сильні короткосяжні кореляції частинок; встановлено умови виникнення щілини в спектрі та зміни характеру провідності; досліджено динаміку переносу заряду (т. зв. ефект скорельованого протон-електронного переносу) вздовж водневого зв'язку.

Запропоновано модель, на основі якої описано термодинамічні властивості та фазові переходи до суперіонних фаз у кристалах сім'ї $M_3H(XO_4)_2$ ($M=Rb, Cs, NH_4$; $X=S, Se$), що пов'язані з переходами “лад-безлад” та “локалізація-делокалізація” у протонній підсистемі; досліджено вплив орієнтаційної динаміки іонних груп XO_4 на послідовність фазових переходів та топологію фазових діаграм. Сформульовано механізм протонного транспорту, що базується на сильній локальній протон-фононній взаємодії та ефекті протонного полярона; розраховано енергії активації провідності в сегнетоеластичних і суперіонних фазах та запропоновано кількісну інтерпретацію спостережуваних температурних залежностей.

Описано інтеркаляцію іонів у напівпровідники в рамках двозонної псевдоспін-електронної моделі. Проаналізовано можливість виникнення у системі фазового розшарування на фази з різною концентрацією іонів. Запропоновано мікроскопічний механізм електретного ефекту, породженого інтеркаляцією нікелем, у шаруватих кристалах селенідів галію та індію.

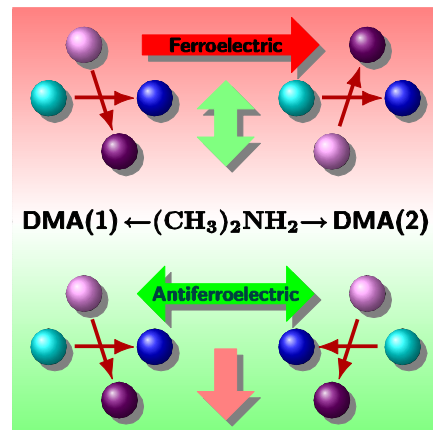
Опрацьовано загальну схему розрахунку термодинамічних і динамічних величин для спінових ґраткових моделей із різними типами взаємодій. Розвинуто теорію термодинамічних властивостей квантових спінових ланцюжків із регулярнозмінними чи випадковими параметрами, а також теорію динамічних властивостей квантових спінових ланцюжків. Проаналізовано ефекти, зумовлені локалізованими магнетонами чи електронними станами у квантових спінових чи електронних моделях на одно-, дво- і тривимірних геометрично



фрустрованих ґратках (нестійкість Пайєрлса у сильних зовнішніх магнітних полях, залишкова ентропія в основному стані, універсальна низькотемпературна термодинаміка, фазові переходи геометричної природи, феромагнетизм електронних моделей в основному стані тощо).

У теорії складних та змішаних сегнетоелектричних систем запропоновано мікроскопічні багатостанові моделі з базисним врахуванням локальних кореляцій для опису сегнетоелектриків, у яких співіснують впорядкування сегнето- та антисегнетоелектричного типу вздовж різних осей; на цій основі розвинено теорію термодинамічних та діелектричних властивостей кристалів DMAAlS-DMAGaS, фосфіту гліцину та сегнетової солі. Описано спостережувані аномалії поперечної компоненти діелектричної сприйнятливості кристалу фосфіту гліцину у поперечному електричному полі, передбачено подібний ефект у сегнетовій солі.

З'ясовано особливості механізмів структурних фазових переходів, що пов'язані зі зміщеннями та впорядкуванням іонів, запропонована інтерпретація спектрів комбінаційного розсіяння та інфрачервоного поглинання, а також фононних внесків у калориметричних вимірюваннях. Розроблені теоретичні моделі задовільно описують дані експериментів для кристалів KDP, CDP.



Розвинуто теорію польових ефектів у сегнетоелектричних кристалах із водневими зв'язками для випадків сегнето- і антисегнетоелектричних фазових переходів, а також для кристалів, у яких реалізується фаза протонного скла. На цій основі описано сукупність ефектів, що стимульовані впливом зовнішнього електричного поля та механічних напружень. Досягнуто задовільний опис численних експериментальних даних для кристалів сімейств KDP, ADP, CDP та сегнетової солі.

Для змішаних сегнетоелектриків проведено розрахунки фазових діаграм у кластерному наближенні з врахуванням нерівноважного розподілу елементів структури, що впорядковуються сегнето- або ж антисегнетоелектричним способом. Показано, що фаза дипольного скла може бути кількісно описана за допомогою нестохастичного розподілу набору парних кореляційних функцій для елементів структури, які є найближчими сусідами. Запропонована теорія має пряме відношення до пояснення експериментально спостережуваних властивостей твердих сумішей сегнетоелектричних кристалів RbH₂PO₄ та сегнетоелектричних кристалів NH₄H₂PO₄ (Rb_n(NH₄)_{1-n}H₂PO₄).

Нерівноважні процеси і явища переносу

Дослідження нерівноважних процесів та явищ переносу у конденсованих системах були започатковані у 1980 році за ініціативою академіка І.Р.Юхновського. На той час вони стосувались проблем зворотньоосмотичних процесів переносу водних розчинів крізь пористі середовища та розрахунків часових кореляційних функцій і коефіцієнтів переносу для розчинів електролітів. Подальші напрямки досліджень нерівноважних процесів формувались під впливом професора Д.М.Зубарева (Математичний інститут ім. В.Стеклова РАН). В результаті виникли цілі напрямки досліджень нерівноважних процесів і явищ переносу у густих газах, плазмі, полярних і магнітних рідинах та розчинах електролітів (М.В.Токарчук, І.М.Мриглод, І.П.Омелян, Т.М.Брик).

Теорія кінетичних та гідродинамічних процесів. На основі методу нерівноважного статистичного оператора Зубарева запропоновано концепцію угодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів у густих газах, рідинах та сумішах. На цій основі отримано модифіковані групові розклади до ланцюжка рівнянь ББГКІ для нерівноважних функцій

розподілу частинок. Вперше у наближенні парних зіткнень послідовно виведено кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскога для системи твердих сфер та отримано узагальнені рівняння Енскога в кільцевому наближенні для моделі твердих сфер та кінетичне рівняння Боголюбова-Леннарда-Балеску для густої плазми. Запропоновано кінетичне рівняння для системи взаємодіючих частинок із багатосходинковим потенціалом взаємодії, для якого доведено Н-теорему Больцмана. Розвинуто концепцію узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів для густої плазми у власному електромагнітному полі з врахуванням кінетики фотонів. Отримано узагальнені рівняння гідродинаміки з коефіцієнтами переносу в'язкості, теплопровідності та взаємодифузії, що враховують нерівноважність фотонного поля.

Для класичних рідин на основі запропонованої концепції отримано зв'язану систему рівнянь для нерівноважної одночастинкової функції розподілу та середнього значення потенціальної енергії взаємодії, яка для слабо нерівноважних процесів дає змогу досліджувати колективні збудження, часові кореляційні функції та узагальнені коефіцієнти переносу для проміжних значень хвильового вектора і частоти. У довгохвильовій границі було доведено існування кінетичних мод.

В узагальненій гідродинамічній теорії рідин запропоновано оригінальний підхід – метод узагальнених колективних мод, який дозволяє в рамках єдиного формалізму досліджувати спектри узагальнених колективних збуджень, часові кореляційні функції, а також $(\mathbf{k}, \omega)$ – залежні коефіцієнти переносу в густих рідинах та сумішах. Метод сформульовано у комп'ютерно-адаптованій формі, вільній від будь-яких параметрів припасування і зручній для поєднання засобів аналітичної теорії та комп'ютерного моделювання. Формалізм узагальнених колективних збуджень використано для дослідження динаміки простих, напівквантових та магнітних рідин, рідких металів і сплавів, а також бінарних та багатокомпонентних сумішей. Числові результати отримано для широкої області зміни хвильового вектора та частоти (від гідродинамічного режиму до області гаусової поведінки). Вони наглядно демонструють добре узгодження із даними молекулярної динаміки. Серед низки нових результатів можна виділити наступні: з'ясування механізму виникнення зсувних хвиль та збуджень типу “теплова хвиля” у простих рідинах та їх сумішах; пояснення природи прояву явища “швидкий звук” у бінарних сумішах із великою різницею мас частинок та у рідинах, де є суттєвими квантові ефекти; отримання аналітичних виразів для динамічних структурних факторів магнітних рідин та багатокомпонентних сумішей у гідродинамічній області.

У динамічній теорії молекулярних рідин розвинуто метод узагальнених колективних мод для дослідження повздовжніх динамічних флуктуацій. Отримано аналітичні вирази для часових кореляційних функцій та узагальнених коефіцієнтів переносу, пов'язаних із флуктуаціями числа частинок, імпульсу та енергії із врахуванням розподілу атомів у молекулі. Запропонований підхід застосовано до опису динамічних процесів у воді на базі моделі TIP4P. Для цієї моделі проведено також комп'ютерний експеримент методом молекулярної динаміки. На основі порівняння теоретичних і молекулярно-динамічних результатів показано, що врахування немарківських ефектів у кінетичних ядрах пам'яті дає змогу не тільки якісно описати, але й кількісно розрахувати об'ємну в'язкість, теплопровідність і динамічний структурний фактор води в усій області частот і хвильових векторів, використовуючи лише декілька узагальнених колективних мод. Продемонстровано, що явне врахування атомної структури молекули є важливим як в області середніх і великих значень хвильового вектора, так і в довгохвильовій границі.

У теорії динамічних властивостей спінових рідин запропоновано новий підхід у комп'ютерному експерименті, що базується на формалізмі операторів Ліувілля для опису гамільтонової динаміки у поєднанні з застосуванням факторизацій експоненційних пропагаторів. Це дало змогу провести розрахунок динамічних структурних факторів «спін-спін», «спін-густина» і «густина-густина» для гайзенбергівської моделі рідини. Встановлено

можливість поширення повздовжніх спінових хвиль у магнітних рідинах на звуковій частоті, що слід розглядати як новий ефект, який може спостерігатись експериментально.

У теорії квантових рідин проведено дослідження динамічних властивостей напівквантового He-4 у квазігідродинамічній області. Отримано рівняння узагальненої гідродинаміки та проаналізовано спектр колективних збуджень в області малих та проміжних значень хвильового вектора. Проведено розрахунок динамічного структурного фактора та інших кореляційних функцій при температурах 4 K та 8 K із виділенням парціальних вкладів кожної із колективних мод. Показано, що поява експериментально спостережуваного плато в динамічному структурному факторі добре описується в рамках запропонованої моделі. Проведено розрахунок просторово-часової дисперсії коефіцієнтів переносу.

Розроблено підхід **узгодженого опису кінетики та гідродинаміки у багатобозонних системах**. Побудовано узагальнені рівняння переносу для сильно- та слабонерівноважних бозе-систем із використанням методу нерівноважного статистичного оператора. Отримано узагальнені коефіцієнти переносу з урахуванням узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів.

Вперше на основі методу нерівноважного статистичного оператора Зубарева сформульовано **нерівноважну термодинамічну динаміку** для опису квантовопольових систем. Одержано узагальнені рівняння переносу узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів у термодинамічному представленні, які застосовано до кварк-глюонної плазми.

Теорія релятивістичних систем

Основне завдання досліджень у цьому напрямі полягає у побудові теорії релятивістичних систем, що має на меті розробку та застосування теоретичних методів опису взаємодіючих частинок у ситуаціях та режимах, для яких істотними є релятивістичні ефекти. Фізичними системами, про які йдеться, можуть бути як макроскопічні, так і мікроскопічні об'єкти з внутрішньою структурою, зокрема системи тіл із гравітаційною взаємодією, атоми та їх ядра, адрони (у рамках кваркових моделей) тощо. Ідейним натхненником та організатором розвитку цього напрямку в Україні був Роман Пантелеймонович Гайда (1928-1998 рр.) – доктор фізико-математичних наук, професор, дійсний член Наукового товариства ім. Т. Шевченка у Львові, голова фізичної комісії НТШ, член Американського математичного товариства. У 70-х рр. він об'єднав науковців, що працювали у різних установах, але займалися спільною науковою тематикою у галузі релятивістичної теорії прямих взаємодій – нетрадиційного підходу до опису релятивістичних систем частинок без використання поняття поля як носія взаємодії (Ю.Б.Ключковський, В.І.Третяк, А.А.Дувіряк, Ю.Г.Яремко, В.Є.Шпитко).

В Інституті отримано вагомі результати в розвитку **класичної та квантової релятивістичної динаміки**. Поряд із принциповим обґрунтуванням можливості послідовного Пуанкаре-інваріантного опису широкого класу реалістичних прямих взаємодій, вдалося розробити низку методів для опису релятивістичних ефектів у системах взаємодіючих частинок. Здійснено формулювання геометричної концепції форм релятивістичної динаміки; на її основі розвинуто послідовну схему лагранжевого опису системи частинок, що використовує вищі похідні коваріантних (фізичних) координат; досліджено його зв'язок із нелокальними лагранжіями, характерними для формалізму типу Фоккера; проведено перехід до гамільтонового опису та різних реалізацій квантування. Виведено релятивістичні правила додавання взаємодій у лагранжевому та гамільтоновому описах, побудовано теорію обертових неточкових контактних перетворень із застосуваннями в електродинаміці Вілера-Файнмана. Введення релятивістичних змінних центра мас дозволило суттєво розширити клас інтегровних двочастинкових моделей. Побудовано нові точно інтегровані моделі релятивістичних дво- і N-частинкових систем у рамках фронтальної, ізотропної форм динаміки та фоккерівського

формалізму. Проведено ґрунтовні дослідження слабкорелятивістичних наближень для різноманітних феноменологічних та польових взаємодій у класичному, квантовому та статистичному підходах.

Побудований цілісний підхід до опису релятивістичних систем частинок дав змогу уникнути проблем, характерних для теоретико-польових описів взаємодій (неперенормовність, проблема зв'язаних станів тощо), і отримати важливі фізичні результати. Серед них варто виділити такі: отримання вищих квазірелятивістичних поправок для систем частинок із електромагнітною та гравітаційною взаємодіями, а також точні вирази для взаємодій довільної тензорної розмірності; обчислення спектрів таких двочастинкових систем та встановлення їх узгодженості з результатами квантової електродинаміки, хромодинаміки та загальної теорії відносності; побудова на базі теорії ефективних полів із вищими похідними Пуанкаре-інваріантної потенціальної 2-кваркової моделі, яка, на відміну від інших відомих підходів, добре відтворює характерні риси спектрів як важких, так і легких мезонів; обчислення квазірелятивістичних поправок до термодинамічних функцій слабонеідеального газу та точно розв'язуване релятивістичне узагальнення моделі газу твердих стержнів, а також отримання важливих співвідношень для статистичної механіки точкових зарядів.

Останнім часом тематика досліджень у галузі релятивістичної динаміки значно розширилась, охоплюючи моделі **квантової теорії поля, класичних безмасових полів** у часопросторових континуумах різної вимірності, **релятивістичної гідродинаміки**.

Запропоновано новий метод виведення **релятивістичних хвильових рівнянь** для системи частинок (бозонів, ферміонів) із врахуванням релятивістичних ефектів запізнення. В його основу взято відповідні результати для інтегралів дії типу Фоккера, що відомі з теорії прямих взаємодій. Метод застосовано для широкого класу взаємодій та апробовано пертурбативно та чисельно на фізично цікавих прикладах. Попередні результати для польових систем отримано на прикладі узагальненої моделі Юкави. Для векторної (електромагнітної) та скалярної взаємодій отримані рівняння узгоджуються із відомими у літературі.

Необхідність розв'язання квантово-механічних задач із сильним зв'язком привела до розвитку **непертурбативних та псевдо-пертурбативних методів**, таких як розклади за $1/N$ (оберненою розмірністю) чи $1/l$ (оберненим моментом імпульсу). Їх застосування до релятивістичних задач було обмежене як через недостатню розвиненість методів, так і через складність задач. В Інституті запропоновано схему непертурбативного аналізу двочастинкових рівнянь Дірака, що виникають в ефективних теоріях поля, шляхом їх радіальної та алгебричної редукції. Завдяки цьому знайдено низку точно розв'язуваних прикладів, що є інтегровними розширеннями відомих у літературі діраківських осциляторів. На основі двочастинкового рівняння Дірака побудовано потенціальну модель легких мезонів, яка добре відтворює експериментально спостережувану поведінку траєкторій Редже.

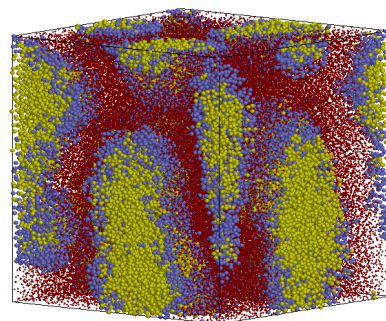
Фізика м'якої речовини

Фізика м'якої речовини – відносно новий напрямок природознавства, який знаходиться на передньому краю розвитку сучасних новітніх технологій практично в усіх сферах життєдіяльності людини і, як наслідок, дуже інтенсивно розвивається. Поняття м'якої речовини виникло більш ніж 30 років тому і поступово зайняло вагоме місце у фізиці конденсованих систем. Цим терміном окреслюють тепер широке коло об'єктів, що раніше традиційно відносились до сфери хімічних, біологічних або матеріалознавчих досліджень.

Інститут є базовою установою НАН України по координації досліджень в області фізики м'якої речовини і бере активну участь у роботі Наукової ради з проблеми “Фізика м'якої речовини” при Відділенні фізики і астрономії НАН України. В рамках різних наукових програм та проектів в ІФКС НАН України проводиться широкий спектр фундаментальних теоретичних

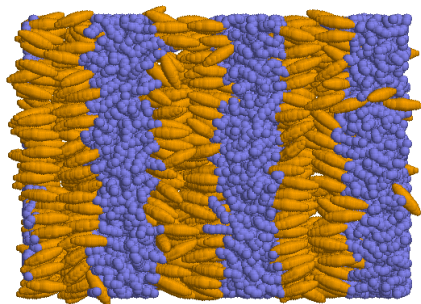
та комп'ютерних досліджень, які мають за мету зрозуміти фізичні аспекти феномену м'якої речовини (М.Ф.Головко, І.М.Мриглод, А.Д.Трохимчук, Ю.В.Калюжний, С.П.Глушак, Ю.Я.Дуда, Я.М.Ільницький, Т.Г.Соколовська, Р.О.Соколовський, А.Б.Баумкетнер, В.І.Капко, Т.М.Брик). Серед широкого класу систем, які відносяться до об'єктів м'якої речовини, вченими інституту більш детально вивчаються наступні:

Колоїдні дисперсні системи, характерною ознакою яких є одночасна присутність частинок, розміри яких відносяться до різних просторових масштабів – молекулярного, субмікроскопічного або нанометрового та макроскопічного. Для опису таких систем запропоновано загальну теорію розрахунку ефективних взаємодій, що враховує специфіку, пов'язану з одночасною присутністю кількох масштабів довжин. Показано, що як відхилення від сферичної форми менших частинок, так і збільшення полідисперсності їх розмірів приводить до послаблення структурного відштовхування між поверхнями великих частинок. Проведено узагальнення методів теорії рідин з метою опису фазової поведінки полідисперсних колоїдних систем. Показано, що полідисперсність розширює область фазового співіснування у порівнянні з монодисперсними системами.



Для електролітичних колоїдних розчинів сформульовано молекулярну теорію гідратаційних взаємодій та запропоновано механізм утворення тонких колоїдних плівок, який пояснює природу спостережуваного експериментально явища стрибкоподібного зменшення товщини колоїдних плівок. Отримані результати застосовано для інтерпретації експериментів зі стійкості сурфактантних іонно-міцелярних розчинів.

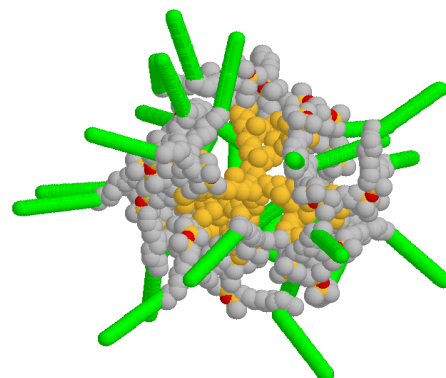
Рідкокристалічні системи: Метод інтегральних рівнянь Орнштейна-Церніке узагальнено для опису властивостей нематичних рідкокристалічних систем та колоїдно-нематичних сумішей. Запропоновано ряд нових молекулярних моделей, у рамках яких досліджено особливості нематичних фазових переходів. Розвинуто молекулярну теорію ефективних міжколоїдних взаємодій та взаємодії колоїдів із поверхнею у нематичних розчинах при наявності зовнішніх полів.



Проводяться теоретичні дослідження сольватаційних процесів у полярних нематичних рідких кристалах. Зокрема, розробляється теорія для опису реакцій переносу електрона у рідких кристалах. Зроблено передбачення, що в повільно релаксуючих рідкокристалічних системах реакція електронного переносу може відбуватися як в ергодичному, так і в неергодичному режимах.

Проводиться комп'ютерне моделювання орієнтаційного впорядкування малих молекул (таких як, ацетилен, пропин, бензол, бетин та інші) у нематичному рідкому кристалі. Отримані результати є надзвичайно корисними для розробки теоретичних моделей і використовуються нині для інтерпретації даних експериментальних вимірювань методом ядерного магнітного резонансу.

Методами дисипативної динаміки досліджується внутрішня динаміка полімерних рідких кристалів зі складною розгалуженою топологією – гребінчастих, зірко-подібних, дендритних тощо. Це дало можливість зрозуміти мікроскопічні механізми, які задіяні у явищах фотоіндукованої деформації в азобензинових полімерних плівках.



Макромолекулярні системи, серед яких слід виділити полімерні та біополімерні розчини, полімерні розплави та колоїдно-полімерні суміші. Проводяться теоретичні та комп'ютерні дослідження структурних властивостей систем із полімерів складної топології, таких як зіркові полімери у доброму розчиннику та розплави зіркових молекул.

Методами *ab initio* молекулярної динаміки та інтегральних рівнянь проводяться дослідження гідратної структури ланцюгових молекул із гідрофобними та гідрофільними групами, що є надзвичайно важливо для аналізу конформаційних властивостей біополімерів.

Розробляється теорія для розрахунків фазової діаграми полідисперсної суміші колоїдів та ланцюгових молекул. У рамках цих досліджень проведено аналіз повної фазової діаграми суміші, який включає розрахунок бінодалей, кривих точок роси та пароутворення, а також фракціювання співіснуючих фаз. Показано, що колоїдно-полімерні системи розділяються у фазу збагачену колоїдними частинками та густу полімерну фазу.

Самоасоційовані системи (self assembling systems) виникають при розчиненні амфифільних молекул у водно-неполярних розчинах і характеризуються широкою різноманітністю фазових структур, найпростішими з яких є міцели. Сформульовано просту доступну для теоретичного опису модель обернених міцел, яка передбачає присутність білка в міцелі. Запропонована модель використана для аналізу результатів експериментальних вимірювань розчинення молекул цитохрому в обернених водних міцелах. Отримано зсув точки перколяції в область малих концентрацій міцел і вказано на існування порогового значення концентрації. Вивчаються також проблеми розчинення неполярних молекул у прямих міцелах з метою їх транспорту у водних середовищах, включаючи цілеспрямовану доставку ліків у живих організмах.

Методом дисипативної динаміки проводиться комп'ютерне моделювання морфологічних особливостей та молекулярної конформації сумішей ланцюгових, зіркових та гребінчастих кополімерів із різними видами внутрішніх розгалужень. В залежності від архітектури молекул та концентрації виявлено широку різноманітність фазових структур, включаючи кубічну, гексагональну, жиродну, ламелярну, біконтинуальну (лабіринтну) та інші фази.

Біологічні системи, зокрема такі як білки та мембрани. Проведено дослідження проблеми згортання модельного протеїну в структурний стан, що складається з трьох альфа спіралей. На молекулярному рівні вивчено проблему ранньої стадії агрегації білків, на якій утворюються олігомери відносно малих розмірів.

Проводяться числові дослідження структури та реакції згортання різних модифікацій спеціального типу білка – амилоїд бета пептиду (A β), який має відношення до хвороби Альцгеймера. У цьому напрямку, вперше отримано мікроскопічну структуру A β білків, які безпосередньо синтезуються при хворобі Альцгеймера. Надійність отриманих результатів було підтверджено порівнянням із експериментальними вимірюваннями перетину розсіювання у гелієвому газі.

Проводяться дослідження ефективної взаємодії між білковими молекулами, яка виникає після додавання до системи нейтральних або заряджених олігомерних молекул різної довжини. Такі дослідження представляють прикладний інтерес, оскільки присутність олігомерів знижує коагуляційну стійкість протеїнового розчину.

Фізика поверхні та гетерогенний каталіз

Дослідження розпочалися у середині 70-х і мали на меті вивчення властивостей розчинів електролітів поблизу поверхні. Були отримані оригінальні результати, що стосувалися виразів для функцій розподілу (М.Ф.Головко, О.О.Пізіо, І.Й.Куриляк, Є.М.Сов'як). Вказано на особливості структурного впорядкування поблизу поверхні, що дозволило говорити про

механізми мембранної фільтрації, які базуються на розділенні зарядів у приповерхневому шарі. Виведено відповідні рівняння переносу і проведено розрахунки для низки модельних систем, що підтвердили перспективність таких методик (М.В.Токарчук, І.П.Омелян, Р.І.Желем).

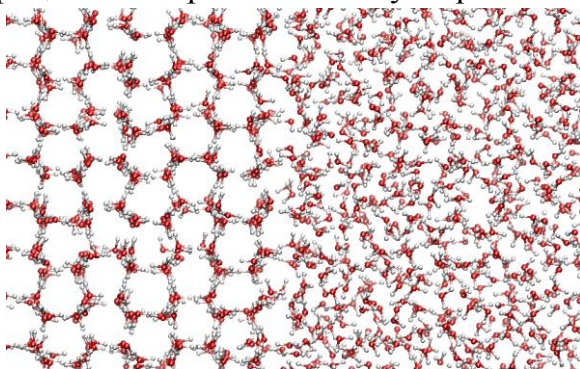
Починаючи із 80-х дослідження поверхні проводяться у кількох напрямках, серед яких: вивчення поведінки густих плинів в умовах просторового обмеження, зокрема у пористій матриці (М.Ф.Головко, А.Д.Трохимчук, Є.М.Сов'як, Т.М.Пацаган); вивчення структурних, адсорбційних та інших властивостей на межі розділу фаз (М.Ф.Головко, Е.В.Вакарін, А.Я.Дуда, А.Ф.Коваленко, Т.Г.Соколовська); розвиток квантово-статистичних методів опису реакційно-дифузійних процесів і фазової перебудови на поверхні твердих тіл (М.В.Токарчук, В.В.Ігнатюк, Т.М.Брик); моделювання поверхневих шарів методами комп'ютерного експерименту (І.В.Стасюк, Н.І.Павленко, І.М.Мриглод, І.П.Омелян, Р.Я.Стеців, Т.С.Мисакович) тощо.

У теорії пористих середовищ знайдено залежності густини частинок розчинника від його діелектричних властивостей, пористості та ступеня іонізації. З умови співіснування фаз досліджено усереднені діелектричні властивості пористого середовища. Показано, що для пористих матриць із малою діелектричною сталою концентрація іонів у порах може переважати їх концентрацію в об'ємній фазі.

Для опису властивостей рідин у пористих середовищах розвинуто техніку багатогустинного формалізму, яка в комбінації із методом реплік дозволила дослідити фазові діаграми метану в кремнеземному ксерогелі. Показано, що наявність пористого середовища приводить до розширення міжфазної області, пониження критичної температури і звуження фазової діаграми у координатах "тиск-густина". Доведено, що за певних умов у порах можуть виникати стани із від'ємною стисливістю, що супроводжується різкою зміною локальної структури.

Методом молекулярної динаміки досліджено властивості метану, адсорбованого в силікагелі. Показано, що утворення контактних шарів на поверхні пор приводить до зменшення рухливості молекул. Отримані значення для коефіцієнта дифузії добре узгоджуються із експериментом. Досліджено вплив зарядженого та діелектричного пористого середовища на ефекти екранування в іонно-молекулярних рідинах. Показано, що в результаті кореляції між частинками з різних пор екрановані потенціали можуть міняти знак та асимптотику.

У теорії поверхневих явищ вивчено умови кооперативної адсорбції молекул на кристалічній поверхні. Показано, що кооперативна адсорбція полімерних та сіткоутворюючих систем на адгезивних поверхнях може спостерігатися у сильнорозведених областях, що обумовлено конкуренцією молекулярних та міжмолекулярних кореляцій адсорбованих молекул. Цей ефект підтверджено експериментально. У випадку адсорбції сіткоутворюючих рідин виявлена можливість фазового переходу змочування із утворенням адсорбованих шарів.



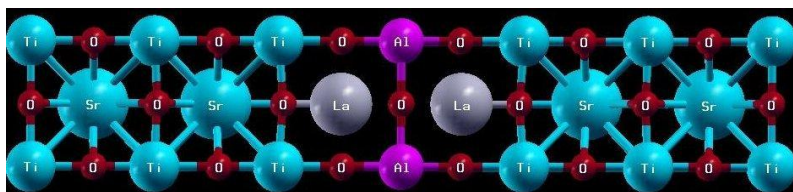
Показано, що адсорбція рідини на кристалічну поверхню може індукувати у субстраті дисторсійний фазовий перехід, поріг якого визначається конкуренцією між жорсткістю субстрату і його деформацією. Структура поверхні, що при цьому виникає, є результатом компромісу між власною симетрією кристалу і гексагональною симетрією, яку прагне утворити адсорбат при збільшенні густини. Вивчено умови локального руйнування ґратки і конденсації адсорбату на цих неоднорідностях.

Запропоновано модифікацію методу інтегральних рівнянь для дослідження впорядкування нематика біля поверхні. На основі уявлень про іонну димеризацію запропоновано пояснення

аномальної поведінки ємності подвійного електричного шару при низьких температурах і/або низьких значеннях діелектричної сприйнятливості розчину. Шляхом інтегрування рівняння Боголюбова для унарної функції іонів поблизу зарядженої поверхні доведено контактну теорему для профіля густини заряду. Отримане співвідношення має нелокальний характер і пов'язує структуру поверхні з її електричними властивостями.

Методом інтегральних рівнянь досліджено вплив заряду поверхні на структуру води у приповерхневому шарі. Вказано на можливість гідролізу води на зарядженій поверхні. Проведено дослідження структурних і термодинамічних властивостей поверхонь розділу фаз рідина/пара та рідина/рідина для ізингівського плинину. Вивчено вплив магнітного поля на поверхневі властивості.

У теорії плівок та гетероструктур отримано прості аналітичні вирази для енергії взаємодії та розклинюючого тиску плівки, що виникають за рахунок структурних сил. Досліджено умови стабільності тонких плівок із моно- та бідисперсних колоїдних суспензій. Показано, що при зростанні об'ємної фракції малих частинок, великі частинки локалізуються поблизу поверхні.



Проведено теоретичні дослідження оптичних властивостей фотонних кристалів та тонких наноплівки, що базуються на використанні часо- та частотно-доменного підходів. Розраховано дисперсійні співвідношення та спектри пропускання для систем із різною геометрією структури (спіральна, полігональна, гвинтова тощо) із врахуванням дефектів періодичності. Передбачено оптимальні параметри наносистем із дефектами, що важливо при конструюванні оптичних інтерференційних фільтрів.

Методом функціоналу густини проведено дослідження переходу типу провідник-ізолятор у гетероструктурах на основі плівок з оксидів перехідних металів. Виявлено, що структурні деформації та іонні зміщення у них супроводжуються виникненням статичних дипольних моментів та ян-теллерівським розщепленням електронних рівнів d-орбіталей поблизу міжфазної границі. Це є ключовим механізмом, що індукує перерозподіл заряду і спричиняє зміну провідних властивостей таких систем.

Методами комп'ютерного моделювання досліджено процеси розділення домішкових зарядів на границі лід/вода. Отримано основні характеристики границь розділу для різних орієнтацій та розраховано профілі вільних енергій для домішкових іонів, що дозволило пояснити селективність у поведінці іонів біля границі лід/вода. Методом функціоналу густини досліджено властивості неоднорідних плиннів за наявності зовнішнього електричного поля.

Проведено дослідження впливу хімічної асоціації на структурні та термодинамічні властивості поверхні рідина/пара. Проведено розрахунки поверхневої енергії і профілів густини в залежності від температури та сили асоціативних взаємодій.

Квантово-хімічними методами досліджено взаємодію води та гідроксильних груп, що утворилися в результаті дисоціації молекул води, з поверхнею окислу кремнію. Розраховано адіабатичні потенціали, знайдено місця локалізації іонів та величини їх ефективних зарядів, розраховано енергії адсорбції і досліджено перерозподіл електронної густини.

У рамках моделі коміркового автомата досліджено процеси корозії твердотільних матеріалів. Розраховано параметри, що характеризують шорсткість поверхні та динаміку корозійного фронту.

У теорії реакційно-дифузійних процесів одержано систему рівнянь переносу для опису динаміки адсорбованих атомів на поверхні металу, що описується з допомогою ефективної

моделі типу Габбарда. У цій моделі дисипативні ядра переносу містять вклади, обумовлені взаємодією адсорбату із фононами субстрату та взаємодіями, які описують хімічні реакції. Показано, що взаємодія із фононною підсистемою може приводити до блокування або ж підсилення певних каналів реакції.

Запропоновано просту модель для опису коадсорбції молекул HCl і H_2O на поверхні льоду. Показано, що для реалістичних значень модельних параметрів механізм коадсорбції приводить до різкого росту покриття льоду хлороводнем. Це дозволило пояснити експерименти по адсорбції HCl на поверхні льоду в стратосферних умовах.

У теорії каталізу показано, що ступені елементарних хімічних реакцій на поверхні є взаємнопов'язані через залежність між хімічним потенціалом асоціативно-дисоціативного балансу і густиною адсорбату біля поверхні. При цьому реакція є чутливою до механізму адсорбції. Дисоціативна адсорбція веде до немонотонної залежності покриття від поверхневої активності, а ступінь дисоціації зростає із ростом адсорбції. З асоціативною адсорбцією пов'язана можливість існування в області малих густин критичної точки, в околі якої адсорбційні ізотерми стають розривними.

Досліджено вплив неактивних домішок на кінетику реакції синтезу CO_2 . Для випадку швидкої реакції отримано кінетичні фазові діаграми, що містять область бістабільності. Проаналізовано основний стан моделі і знайдено умови існування неоднорідних фаз, у яких можлива реакція. Запропоновано нову активаторну модель для опису явища реконструкції поверхні та появи осциляційної динаміки при каталітичній реакції окислення CO на поверхні $\text{Pt}(100)$. Показано, що явище поверхневої реконструкції описуються у рамках нерівноважного фазового переходу 1-го роду із бістабільним станом. Отримані біфуркаційні діаграми добре узгоджуються із експериментом. Запропоновано пояснення механізму появи нерегулярних осциляцій, що виявлені експериментально.

Прикладні дослідження

Фізико-хімічні властивості паливовмісних матеріалів об'єкту "Укриття"

Роботи у цьому напрямку розпочалися у 1993 р. з ініціативи академіка І.Р.Юхновського. Було сформульовано дві основні задачі, орієнтовані на дослідження процесів міграції радіонуклідів у ґрунтах і ґрунтових водах чорнобильської зони та вивчення взаємодії водних розчинів і води з паливовмісними матеріалами (ПВМ) в об'єкті "Укриття". Ці роботи виконувалися спершу в рамках спільного відділу ІФКС НАН України та Міжгалузевого науково-технічного центру (МНТЦ) "Укриття" НАН України (зав.відділу – д.ф.-м.н. М.В.Токарчук). Згодом, із розширенням переліку актуальних проблем, до цих задач поступово приєдналися інші групи дослідників, зокрема проф. І.В.Стасюка, проф. М.Ф.Головка, д.ф.-м.н. І.М.Мриглода. Дослідження проводилися у тісній співпраці із науковцями МНТЦ "Укриття" НАН України (група д.ф.-м.н. О.В.Жидкова), Інституту фізики НАН України (група акад. НАН України А.Г.Наумовця та д.ф.-м.н. І.М.Яковкіна), Інституту ядерних досліджень НАН України (групи чл.-кор. НАН України В.Й.Сугакова та проф. В.М.Павловича), Інституту теоретичної фізики НАН України (група акад. НАН України А.Г.Загороднього), Інституту хімії поверхні НАН України (група к.х.н. В.М.Міщенко), Центру математичного моделювання ІППММ НАН України (група д.ф.-м.н. Є.Я.Чаплі), Львівського національного університету імені Івана Франка (група проф. А.С.Волошиновського), Національного університету "Львівська політехніка" (група с.н.с. І.М.Кріпа), Одеського національного університету (група д.ф.-м.н. Г.С.Драгана), ДСП "Техноцентр" (група к.ф.-м.н. С.Б.Кумшаєва). Було виділено низку найактуальніших задач, що включали в себе дослідження: радіаційної стійкості ПВМ; механічних, діелектричних і магнітних властивостей лавоподібних паливовмісних матеріалів (ЛПВМ); явища пилоутворен-

ня та динаміки субмікронного радіоактивного пилу; процесів окислення і взаємодії ПВМ із водними розчинами тощо. Ці роботи стимулювали проведення низки важливих експериментів, що дозволили встановити ядерно-фізико-хімічні характеристики різних форм перебування ядерного палива у зруйнованому блоці та виробити рекомендації щодо поводження із ними на різних етапах перетворення об'єкту "Укриття" в екологічно безпечну систему. Таким чином, було створено потужний колектив науковців для комплексного вирішення проблеми.

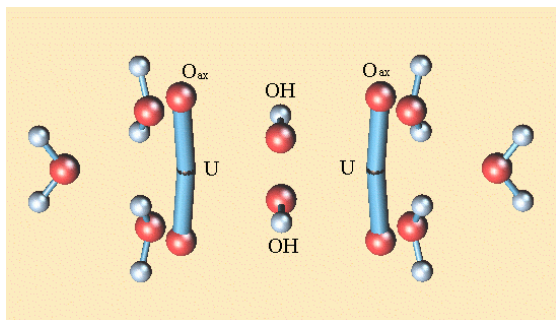
Серед основних досягнень у цьому напрямку зазначимо наступні:

- Розроблено та апробовано декілька моделей ЛПВМ, що дозволяють пояснити їх основні фізичні властивості, які спостерігаються експериментально, зокрема діелектричні, магнітні та механічні, і беруть до уваги фактор радіаційного дефектоутворення як основну причину зміни цих властивостей. **На цій основі може будуватися комплексна модель поведінки паливовмісних матеріалів ПВМ, придатна для довгострокового прогнозування.**
- Вказано на важливу роль води в об'єкті "Укриття". Отримані результати дозволяють виділити низку факторів (вилуговування радіонуклідів, комплексоутворення у водних розчинах і осади, деструктивна роль при взаємодії з поверхнею ЛПВМ, адсорбційні явища тощо), які **необхідно враховувати при побудові прогнозової моделі і проведенні моніторингу в об'єкті.** Роль води посилюється із врахуванням молекулярно-ситових властивостей ЛПВМ.
- Проведено попередні дослідження стабільності ЛПВМ, що враховують фактор внутрішнього самоопромінення цих матеріалів. Проаналізовано основні причини і механізми деградації ЛПВМ. Виконано оцінки часу до початку спонтанного об'ємного саморуйнування цих матеріалів, які показують, що попередні прогнози були завищені на кілька порядків – **інтенсивність процесів саморуйнування ЛПВМ сильно зростає уже в найближчі роки.**
- Запропоновано та апробовано методику розрахунку динаміки субмікронного пилу у повітряному середовищі. Розроблено відповідні алгоритми і програми, придатні для отримання довгострокових прогнозів. Показано, що **субмікронні пилові частки до моменту свого осідання можуть зависати в атмосфері на роки і мігрувати на відстані порядку тисяч кілометрів.** Інша обставина, яка спонукає до більш інтенсивних досліджень властивостей субмікронних частинок з радіоактивними елементами у водному середовищі, пов'язана із встановленням факту їх значного впливу на локальні хімічні властивості через ефекти гідролізу, що приводить до зміни конформаційних властивостей біологічно активних молекул і пояснює механізм токсичної дії таких частинок.
- Проведено комплекс досліджень із вивчення механізмів спонтанної генерації субмікронних частинок із поверхні ЛПВМ. У рамках моделі коміркового автомата досліджено процеси саморуйнування твердих матеріалів, що містять у собі радіоактивне паливо. Отримано ряд



Наукові відрядження до об'єкту "Укриття".

характеристик для опису шорсткості поверхні матеріалу та динаміки деградації поверхні. В рамках такого підходу вдалося відтворити експериментально отримані гістограми розподілу пилових часток за розмірами і пояснити основні їх особливості. Вказано на фактори ризику, що **пов'язані із можливістю об'ємного саморуйнування ЛПВМ та обумовленого цим різкого зростання інтенсивності пилогенератії**.



Запропоновано кілька нових **перспективних підходів до вирішення питань моніторингу стану ПВМ і вирішення технологічних питань**. Зокрема, йдеться про: моніторинг концентрації та розподілу субмікронних пилових часток в об'єкті "Укриття" на основі оптичних дифракційних методів; контрольоване вилуговування радіоактивних елементів лужними водними розчинами; методики покращення ефективності схем пиловловлювання; використання ефективних сорбційних матеріалів, синтезованих на основі модифікованої природної карбонатомісної глини Янівського родовища сірки (Львівська область), для вилучення радіонуклідів із їх водних розчинів тощо.

них сорбційних матеріалів, синтезованих на основі модифікованої природної карбонатомісної глини Янівського родовища сірки (Львівська область), для вилучення радіонуклідів із їх водних розчинів тощо.

Теоретичні методи оптичного розпізнавання образів, захисту та цифрової обробки інформації

Переважає більшість сучасних систем оптичної обробки інформації базується на використанні методів фур'є-оптики та інтегральних перетворень типу згортки, дискретних ортогональних перетворень Фур'є, Адамара та ін. Останнє десятиліття в оптиці характеризується інтенсивним розвитком теорії дробового фур'є-перетворення (ДФП), яка повніше розкриває закономірності перетворення оптичної інформації і відкриває можливості для створення принципово нових методів та систем оптичної обробки інформації.

З 2000 р. в Інституті вперше в Україні розпочалися наукові дослідження з теорії ДФП на основі методу розподілу сигналів (М.В.Шовгенюк., Ю.М.Козловський). Теоретично доведено, що в процесі ДФП відбувається поворот розподілу вхідного сигналу на інформаційній діаграмі спряжених координат – координата, просторова частота. Виведено ядро ДФП із врахуванням оптичних констант, що дозволило дослідити закономірності формування спряжених зображень ДФП в реальних оптичних системах.

На основі теорії ДФП для задач розпізнавання образів вперше розроблена **оптична система узагальненого корелятора** спільного ДФП еталонного та досліджуваного зображень. Система дозволяє записувати висококонтрастну інтерференційну картину оптично суміщених зображень у довільній площині області ДФП. Розроблена кореляційна схема розпізнавання образів дозволяє суттєво підвищити надійність ідентифікації зображень. Спосіб розпізнавання та пристрій ідентифікації захищені патентом та міжнародною заявкою РСТ.

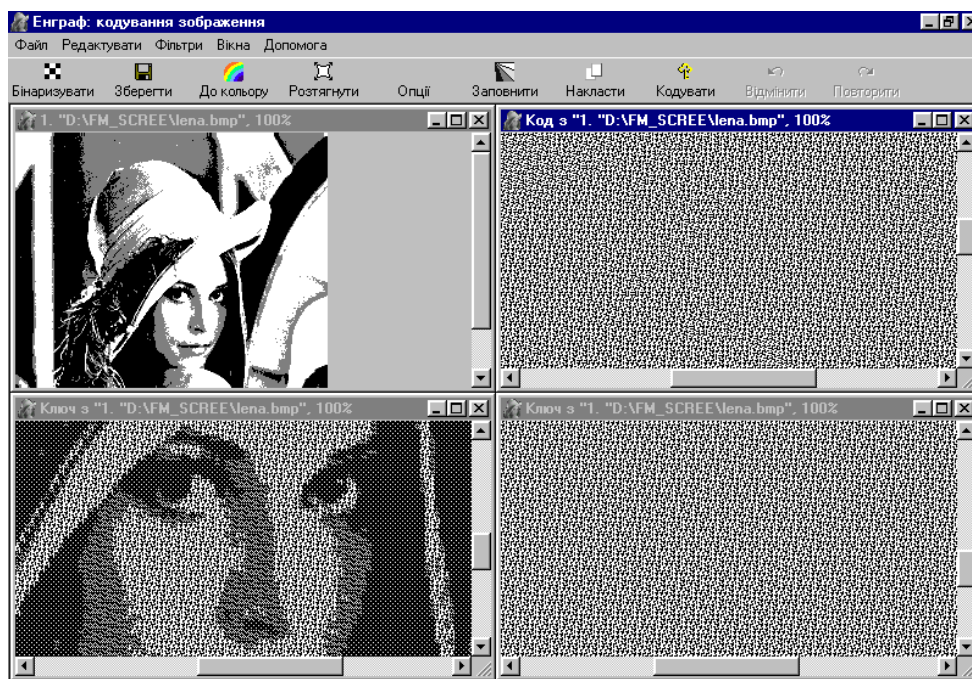
Розвинуто **теорію формування самозображень** періодичних фазових елементів (ефект Тальбота) в області ДФП для інтерферометричних вимірювань. Визначені інваріантні умови формування самозображень. Для різних інваріантних умов отримані аналітичні розв'язки і показано, що процес формування самозображень відбувається в результаті інтерференції скінченного числа елементарних комірок фазового елемента.

Запропонована модель дозволяє точно розраховувати значення інтенсивності рівнів самозображень та експериментальним шляхом визначити різницю фаз періодичних оптичних елементів. Для прикладних задач інтерферометрії ці дослідження проводяться спільно з

Інститутом фотоніки і мікромеханіки Варшавської політехніки. На основі ефекту Тальбота теоретично вивчено умови формування самозображень фазовими решітками з контрастом 100% в області дифракції Френеля та ДФП, які мають перспективи використання для мікролітографії, рентгенівської томографії та атомної інтерферометрії.

Теоретично обґрунтовано принципову можливість **використання ефекту Тальбота для оптичного зондування середовища** з поглинаючими світло мікрочастинками. Врахування показника заломлення середовища приводить до повздовжнього зміщення еквідистантних площин формування самозображення фазової решітки, а наявність поглинаючих мікрочастинок (< 1%) у середовищі стимулює появу самозображень у дробових площинах Тальбота.

Розроблені нові методи цифрової обробки зображень на основі дискретного перетворення Адамара для сучасних технологій захисту цінних паперів та документів (М.В.Шовгенюк, М.П.Козловський, Т.Є.Крохмальський, Т.В.Фітьо, Л.А.Дідух). На основі використання ортогональних матриць Адамара розроблено методи та алгоритми кодування зображень, запропоновано принципово **новий тип графічного елемента захисту** цінних паперів, що складається із кодованого зображення та його ключа, які виготовляються за допомогою спеціалізованої комп'ютерної програми "ГрафіКод 4".



Вікно програми "ГрафіКод 4".

Перевагою запропонованого способу кодування графічного зображення впорядкованими неперіодичними структурами є: абсолютна візуальна нерозрізнимість кодованого зображення, велика кількість різних ключів (біля 2×10^8 варіантів) для розкодування графічної інформації; можливість розкодування зображення високої роздільної здатності з мінімальними шумами; надійність ідентифікації та високий рівень захисту. Розроблена Інститутом технологія захисту цінних паперів захищена патентами України та США, міжнародною патентною заявкою РСТ.

У рамках інноваційного проекту НАН України у 2007 р. проведено дослідження з промислового освоєння спеціалізованого програмного забезпечення та впровадження нової технології захисту цінних паперів на державному підприємстві поліграфічний комбінат "Україна" із виготовлення цінних паперів та в Національному банку України. Технологія оптичного захисту цінних паперів демонструвалася на виставках в Україні, США та Німеччині.

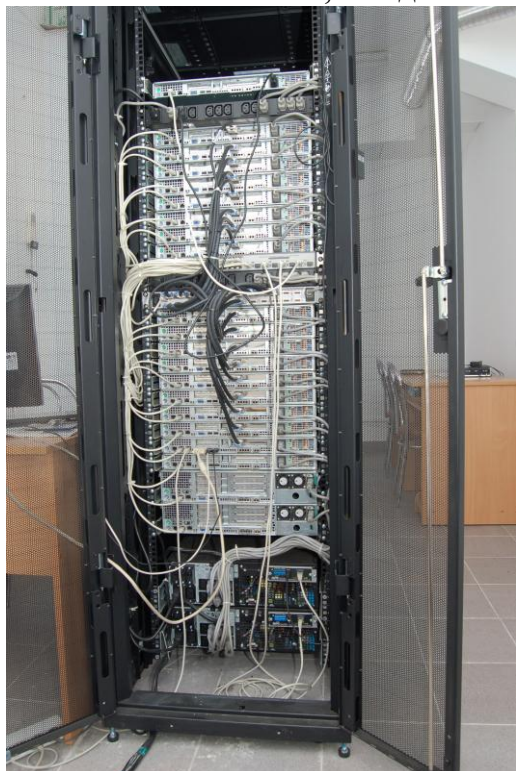
Розробляються **нові методи цифрової обробки кольорового зображення** для видавничо-поліграфічних систем (М.В.Шовгенюк, Н.С.Писанчин, Т.В.Фітьо, Н.В.Занько). На основі дискретного перетворення Хартлі запропоновано новий кольоровий простір ICaS, який

використано для розробки цифрових методів кольороподілу зображень із врахуванням реальних параметрів і характеристик процесу друку, що дозволяють моделювати умови синтезу кольорів реальними фарбами на друкарському відбитку. В рамках інноваційного проекту НАН України 2008 р. розроблено спеціалізовану комп'ютерну програму "ICaS Колір Друк-1", що базується на новій технології кольороподілу зображень, та пакет програмного забезпечення для проектування оптимальних технологічних процесів відтворення кольорового зображення у видавничо-поліграфічних системах.

Сучасні інформаційні та комп'ютерні технології в науці та освіті

У 1992 р. в ІФКС НАН України започатковано проект UARNet – Українська академічна і дослідницька мережа, в рамках якого в лютому 1993 р. здійснено *перше в Україні підключення до глобального Інтернету некомутованими лініями зв'язку*. Згодом (1995 р.) в Інституті було створено окрему лабораторію інформаційних технологій та комп'ютерних мереж, яка з 1999 р. діє як окреме Державне підприємство "Науково-телекомунікаційний центр "Українська академічна і дослідницька мережа" ІФКС НАН України.

У 2002 р. *запущено в дію перший у системі НАН України розрахунковий кластер* (16 процесорів із робочою продуктивністю 12,5 Gflops). Після його модернізації у 2004, 2006 та 2008 роках він залишається одним із найпотужніших в Україні. В грудні 2006 кластер ІФКС НАН України був добудований за рахунок встановлення 17 нових вузлів на основі двоядерних процесорів із 64-розрядною архітектурою (Xeon 5130 2 Ghz) і пам'яттю 4 Gb. Це дало змогу збільшити тестову потужність кластера на 310 Gflops. У 2008 р. було проведено заміну частини двоядерних процесорів на чотири ядерні, а також збільшено кількість оперативної пам'яті в чотири рази. В результаті, загальне число ядер збільшилось до 116, а сумарної оперативної пам'яті стало 200 Gb. Усі вузли об'єднані високошвидкісною мережею побудованої на основі технології Infiniband, завдяки якій швидкість обміну даними між вузлами кластера може



досягати 700Мбайт/с в обох напрямках одночасно. Таким чином, тестова продуктивність кластера зросла до 640 GFlops, а *пікова продуктивність кластера становить 928 GFlops*. На кластері, окрім обчислювальних потужностей існує необхідність швидкого та надійного зберігання даних. З цією метою, на кластері ІФКС, на основі масиву дисків об'єднаних за допомогою RAID-5 та мережевої файлової системи Lustre, встановлено накопичувальний сервер загальною ємністю 3 ТБайт.

На вузлах кластері встановлена операційна система Linux на базі дистрибутиву Rocks 4.2. Для організації запуску задач та розподілу завантаження кластера використовується система керування задачами SGE. В якості компіляторів на кластері ІФКС НАН України використовується збірка компіляторів від компаній Intel та Portland Group. Для розробки та запуску паралельних програм встановлено бібліотеку OpenMPI.

Кластер живиться через систему безперебійного живлення, яка спроектована з урахуванням потреб комплексу. Аналіз потужності системи свідчить про можливість функціонування комплексу впродовж часу (10-15 хв.) необхідного для збору даних з обчислювальних вузлів та виключення керуючого вузла із збереженням даних при зникненні напруги у зовнішній мережі живлення.

Приміщення, в якому розміщений кластер, забезпечується системою активної вентиляції і кондиціонування, що створює необхідні для роботи обладнання кліматичні умови.

Налаштування роботи кластера, встановлення всього необхідного програмного забезпечення та поточна технічна підтримка безперебійної роботи кластера забезпечується групою наукових працівників ІФКС (Т.М.Пацаган, О.Я.Фаренюк).

Доступ користувачів до ресурсів кластера здійснюється із робочих місць, підключених безпосередньо в локальну мережу Інституту, а також – через мережу Інтернет, використовуючи захищені методи доступу.

Висока продуктивність кластера забезпечує можливість розв'язування широкого класу задач загальнонаціонального рівня, для реалістичного моделювання яких вимагається, насамперед, використання паралелізованих пакетів програм та великі обчислювальні ресурси. Розрахунковий кластер активно використовується нині для розв'язання складних міждисциплінарних задач прогностного характеру, прикладом яких можуть виступати задачі Чорнобильської проблематики. Найбільш типовими задачами, що виконуються зараз на кластері ІФКС НАН України, є моделювання фізико-хімічних процесів у конденсованих системах за допомогою методів першопринципної та класичної молекулярної динаміки.

У 2007 р. *кластер приєднано до GRID мережі НАН України*. Постійна робота з модернізації кластера і розробки ефективних методів комп'ютерного моделювання мають на меті створення провідного регіонального GRID-вузла та зміцнення позицій Інституту в цьому напрямку.

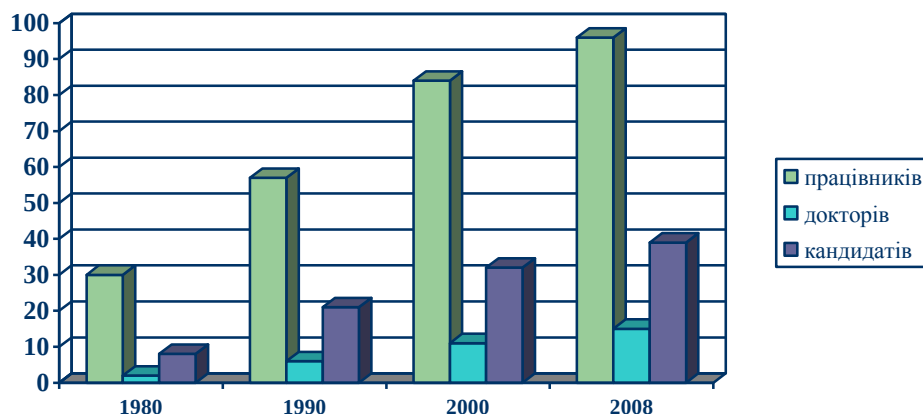
ІФКС НАН України зосереджує велику увагу на кадровому аспекті, зокрема на питаннях підготовки кваліфікованих фахівців для роботи з потужними кластерними системами та суперкомп'ютерами. Цей аспект роботи проводиться, починаючи із студентської молоді і завершуючи підготовкою молодих науковців. Так, для прикладу, розрахунковий кластер Інституту активно використовується для навчання студентів львівських університетів основам паралельного програмування та методам комп'ютерного моделювання. Для цих потреб коштами ІФКС НАН України *створено комп'ютерний клас із прямим доступом до розрахункового кластера*, розроблено відповідні навчальні програми, проводиться навчання працівників Інституту та студентської молоді Львова з набуття навиків роботи з паралелізованими пакетами програм (Т.М.Брик, Т.М.Пацаган, І.І.Клевець).



ПІДГОТОВКА КАДРІВ ВИЩОЇ КВАЛІФІКАЦІЇ

Нині в Інституті працюють чотири члени Національної академії наук України, зокрема, академік І.Р.Юхновський (почесний директор), члени-кореспонденти М.Ф.Головко (завідувач відділу), І.М.Мриглод (директор, завідувач відділу), І.В.Стасюк (завідувач відділу). Загальна чисельність працівників Інституту станом на 01.01.2009 р. становила 96 осіб. Переважна більшість працівників (75 осіб або 80 %) – це наукові працівники, серед яких – 15 докторів і 38 кандидатів наук.

Динаміка зміни чисельності працівників та кадрового складу Інституту



Середній вік наукових працівників ІФКС НАН України не перевищує 40 років (докторів наук – 54, кандидатів наук – 39). Понад 40% наукових працівників Інституту – це наукова молодь. За цими показниками ІФКС НАН України є одним із “наймолодших” у системі НАН України.

Молоді науковці беруть участь у виконанні проектів міжнародних фондів, мають можливість стажуватися за кордоном. Переважна більшість молодих науковців залучається до виконання конкурсної тематики і госпдоговірних робіт. Сьогодні серед молодих вчених Інституту є стипендіати та отримувачі грантів Президента України та Президії НАН України для молодих вчених, грантів Міжнародних фондів імені Гумбольдта та імені Марії Кюрі, стипендіати міжнародної асоціації ІНТАС тощо. У 2007 році запроваджено щорічну стипендію академіка НАН України І.Р.Юхновського для кращих молодих вчених ІФКС НАН України, що встановлена І.Р.Юхновським і виплачується впродовж року із його власних заощаджень.

При Інституті працює **аспірантура** і **докторантура**. Зараз в аспірантурі (з відривом від виробництва) навчаються 7 осіб, у докторантурі – 1 особа.

Активно працює **Рада молодих вчених**, що координує роботу молодих науковців. Рада є ініціатором та активним співорганізатором багатьох конференційних заходів. З 2001 р. за сприяння дирекції в ІФКС НАН України проводиться щорічна Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини.

З 1995 р. при Інституті працює **Спеціалізована рада Д35.156.01 із захистів докторських та кандидатських дисертацій**, яка проводить захисти за трьома спеціальностями: 01.04.02 – “теоретична фізика”, 01.04.07 – “фізика твердого тіла”, 01.04.24 – “фізика колоїдних систем” (голова ради член-кореспондент НАН України І.М.Мриглод, заступник голови – М.П.Козловський, секретар – Т.Є.Крохмальський). За час її діяльності було проведено 40 захистів кандидатських та 10 докторських дисертацій. З них 32 кандидатські та 7 докторських дисертацій захищено працівниками Інституту.

Інститут підтримує і розвиває практику міжнародної співпраці у сфері підготовки кадрів вищої кваліфікації. Так, в останні роки співробітники Інституту захищали дисертації у Польщі (Д.В.Портнягін, PhD дисертація, Інститут математики ПАН, 2007 р.) та Франції (Е.В.Вакарін, габілітаційна дисертація, Університет П'єра та Марії Кюрі, 2008 р.). У січні 2009 р. в Інституті вперше відбувся захист, де на спільному засіданні спеціалізованої ради ІФКС НАН України та журі Університету Анрі Пуанкаре (Нансі, Франція) розглянуто питання про одночасне присвоєння звання кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності "теоретична фізика" та звання доктора фізики і хімії Університету Анрі Пуанкаре працівнику Інституту Олександрю Капикраняну.

ПЕДАГОГІЧНА ДІЯЛЬНІСТЬ

Важливе місце в підготовці молодих фахівців для Інституту займає викладацька робота, яка ведеться нашими співробітниками у кількох вищих навчальних закладах. При ІФКС НАН України працюють філія кафедри інженерного матеріалознавства та прикладної фізики і філія кафедри прикладної математики Національного університету "Львівська політехніка". Ці філії структурно входять до нещодавно створеного Науково-навчального центру ЗНЦ НАН і МОН України, який діє на правах Відділення цільової підготовки при Національному університеті "Львівська політехніка".

В Інституті створено спеціалізований комп'ютерний клас для навчання студентів, що дає змогу опановувати методи виконання складних комп'ютерних розрахунків. Працівники Інституту керують курсовими та магістерськими роботами, є науковими керівниками аспірантів і викладають спецкурси у Львівському національному університеті імені Івана Франка (кафедра теоретичної фізики), у Національному університеті "Львівська політехніка" (кафедра прикладної математики і кафедра інженерного матеріалознавства та прикладної фізики), в Українській академії друкарства (кафедра додрукарських процесів) та в Українському католицькому університеті (кафедра загальної історії). Загалом до викладацької роботи у вищих навчальних закладах щороку залучається більше 10 вчених Інституту. Нещодавно в Інституті почав читатися інтегрований курс лекцій для молодих вчених та аспірантів.

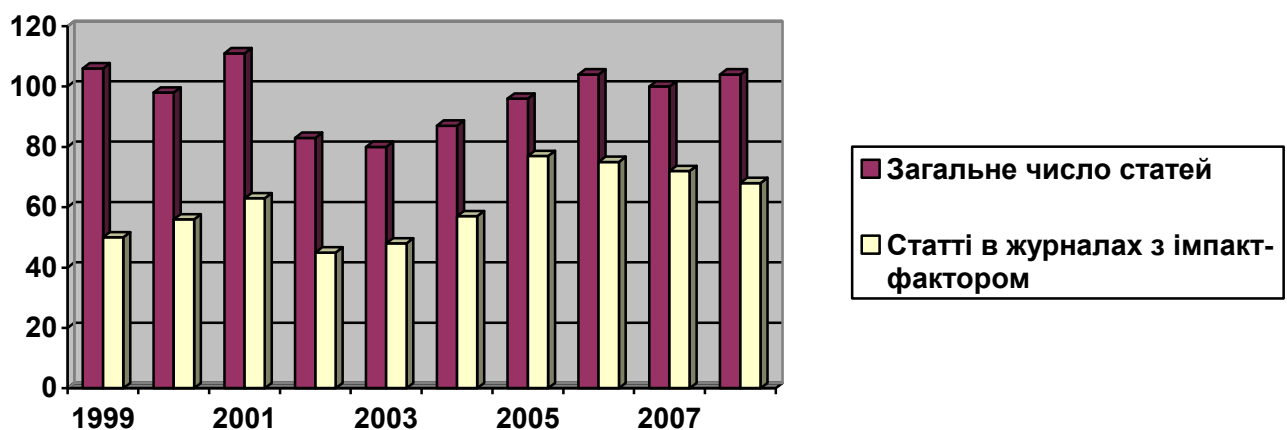
Представники Львівської школи статистичної фізики, базовою установою якої є ІФКС НАН України, успішно працюють нині не лише в академічних установах, але й у стінах багатьох закладів вищої освіти. Так, у Львівському національному університеті імені Івана Франка успішно працюють професори В.С.Височанський, Л.Ф.Блажівський, М.В.Ваврух, В.М.Ткачук, у Національному університеті "Львівська політехніка" працюють П.П.Костробій, Г.В.Понеділок, І.Й.Куриляк, В.О.Коломієць, а професор І.О.Вакарчук, який на момент захисту докторської дисертації у 1980 році став одним із наймолодших докторів наук у колишньому СРСР, очолює нині Міністерство освіти і науки України. Надзвичайно великий вклад у становлення і розвиток Національного університету "Львівська політехніка" зробив його колишній ректор професор Ю.К.Рудавський (1947-2007). Вихованці цієї школи працюють на престиж української науки і в інших навчальних закладах України, а також в університетах США, Канади, Німеччини, Великобританії, Польщі, Франції, Японії, Австрії, Мексики.

НАУКОВІ ПУБЛІКАЦІЇ

Інститут має один із найвищих у НАН України показник кількості опублікованих робіт та рівня цитувань на одного працівника. Щорічно за результатами досліджень науковці Інституту публікують біля 200 наукових праць (статей, препринтів, тез), більшість з яких – це публікації у провідних фахових вітчизняних та закордонних виданнях. **Найчастіше** працівники Інституту публікують статті в таких журналах:

- | | |
|--|-------------------|
| - Condensed Matter Physics – в середньому | – 16 публ./рік, |
| - Журнал фізичних досліджень | – 9 публ./рік, |
| - Journal of Chemical Physics | – 8 публ./рік, |
| - Український фізичний журнал,
Physical Review B, Physical Review E | – по 5 публ./рік, |
| - Journal of Molecular Liquids,
Molecular Physics | – по 3 публ./рік, |
| - Journal of Physics: Condensed Matter,
Ferroelectrics | – по 3 публ./рік, |
| - Physica A | – 2 публ./рік. |

Порівняльна характеристика загальної кількості статей



Вибрані публікації

Монографії

- ◆ И.Р.Юхновский, М.Ф.Головко. *Статистическая теория классических равновесных систем*. – К., Наукова думка, 1980;
- ◆ I.R.Yukhnovskii. *Phase transitions of the second order. Collective variables method*. Singapore, World Scientific, 1987 (переклад видання: И.Р.Юхновский. *Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных*. К., Наукова думка, 1985);
- ◆ И.Р.Юхновский, З.А.Гурский. *Квантово-статистическая теория неупорядоченных систем*. – К.: Наукова думка, 1991;
- ◆ Роман Гайда, Роман Пляцко. *Іван Пулюй. 1845-1918: Життєписно-бібліографічний нарис*. – Львів: Видавництво Наукового товариства імені Шевченка у Львові, 1998;
- ◆ І.Юхновський, М.Козловський, І.Пилюк. *Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах*. – Львів: Євросвіт, 2001;

- ◆ Roman Gajda, Roman Plazko. *Johann Puluĵ Ratsel des universalen Talents*. – Euro Welt-Verlag L'wiw, 2001;
- ◆ Ігор Юхновський. *Вибрані праці. Фізика*. – Львів: Видавництво НУ «Львівська політехніка», 2005;
- ◆ Ігор Юхновський. *Вибрані праці. Економіка*. – Львів: Видавництво НУ «Львівська політехніка», 2005.

Колективні монографії та розділи в них

- Yu.V.Kalyuzhnyi, P.T.Cummings. Equations of state from the analytically solvable integral equation approximations. – In: *IUPAC volume on Equations of State for fluid and fluid mixtures*, eds. J.V.Sengers, R.F.Kayser, C.J.Peters, H.J.White, Elsevier-2000, Chapter 6, p. 169-254.
- D.Henderson, A.D.Trokhymchuk, and D.T.Wasan. Structure and layering of fluids in thin films. – In: *Emulsions: Structure, Stability and Interactions*, Ed. by Petsev D.), 2004, Elsevier Ltd., Chapter 7, pp.259-311.
- *Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory*. (Ed. Yuriĵ Holovatch). Singapore, World Scientific, volume 1 (2004).
(Автор Розділу 3 – О.В.Держко).
- *Ionic Soft Matter: Modern Trends in Theory and Applications* (Proceedings of the NATO ARW, Lviv, Ukraine, April 14-17, 2004), NATO Science Series II, Eds. D.Henderson, M.Holovko, A.Trokhymchuk. – Vol. 206, 2005;
(Автори окремих розділів: М.Ф.Головко, І.М.Мриглод, Т.М.Брик, Ю.В.Калюжний, А.Д.Трохимчук).
- D.J.Henderson, A.D.Nikolov, A.D.Trokhymchuk, D.T.Wasan. Confinement-Induced Structural Forces in Colloidal Systems. In: *Encyclopedia of Surface and Colloid Science*, (Ed. by P.Somasundaran) 2nd Edition, Boca Raton: Taylor & Francis, 2006, pp.1485-1494.
- *Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory*. (Ed. Yuriĵ Holovatch). Singapore, World Scientific, volume 2 (2007).
(Автор Розділу 5 – І.В.Стасюк).
- O.Derzhko. Jordan-Wigner fermionization and the theory of low-dimensional quantum spin models. Dynamic properties. - In: *Condensed Matter Physics in the Prime of the 21st Century. Phenomena, Materials, Ideas, Methods*. Ed. by Janusz Jędrzejewski. - World Scientific, Singapore, 2008, pp.35-87.
- J.Richter, O.Derzhko. Correlated systems on geometrically frustrated lattices: From magnons to electrons. - In: *Condensed Matter Physics in the Prime of the 21st Century. Phenomena, Materials, Ideas, Methods*. Ed. by Janusz Jędrzejewski. - World Scientific, Singapore, 2008, pp.237-270.
- V.Blavatska, C. von Ferber, Yu.Holovatch. Star polymers in correlated disorder. - In: *Path Integrals - New Trends and Perspectives*, edited by W. Janke and A. Pelster. - World Scientific, Singapore, 2008, pp.549-556.
- V.Blavatska, W.Janke. Self-avoiding walks on fractals: scaling laws. - In: *Proceedings of the 9th Intern. Conf. "Path Integrals: New Trends and Perspectives"*, W. Janke and A. Pelster ed. - World Scientific: Singapore, 2008, p.585.

Підручники і посібники

- И.Р.Юхновский, И.И.Курыляк. *Электролиты*. – К.: Наукова думка, 1988;
- І.Р.Юхновський. *Основи квантової механіки*. К., Либідь, 2002 (друге видання: І.Р.Юхновський. *Основи квантової механіки*. К., Либідь, 1995).
- М.В.Шовгенюк, В.Є.Білорус, І.З.Миклушка, В.О.Дудяк. *Ввід і вивід зображень в комп'ютерних видавничих системах*. – Львів: Вид-во Української академії друкарства, 1998;
- Олег Держко, Василь Мигаль. *Вибрані питання теорії неоднорідних класичних плинів*. – Львів, ЛДУ, 1999;
- М.А.Кориневський. *Задачі з фізики з розв'язаннями. Електромагнетизм*. – Львів: Видавництво НУ «Львівська політехніка», 2005.

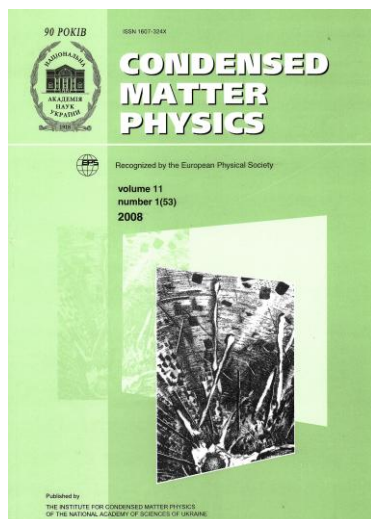
Показчики, нариси, вибрані праці

- *Ігор Рафаїлович Юхновський*: Біобібліографічний показчик. – Львів, 1985;
- *Ігор Юхновський*. Україна – незалежна держава: Виступи, аналітичні статті. – Львів: Західний науковий центр АН України, 1994;
- *Ігор Рафаїлович Юхновський*: Серія: Біобібліографія вчених України. – К.: Наукова думка, 1995;
- *Ігор Васильович Стасюк*: Бібліографічний показчик. Серія: Бібліографія українських вчених. – Львів, 1998;
- *Роман Гайда (1928–1998)*: Біобібліографічний показчик. Серія: Бібліографія українських вчених. – Львів, 1998;
- *Формули життя і творчості академіка Юхновського*. Есе, інтерв'ю, хроніка. - Львів-Київ, 2000;
- *Мирослав Федорович Головка*: Біобібліографічний показчик. Серія: Бібліографія українських вчених. – Львів, 2003;
- *Роман Романович Левицький*: Біобібліографічний показчик. Серія: Бібліографія українських вчених. – Львів, 2003;
- *Зіновій Олександрович Гурський*: Біобібліографічний показчик. Серія: Бібліографія українських вчених. – Львів, 2004.

Один раз на 3 роки видається бібліографічний показчик друкованих праць наукових співробітників ІФКС НАН України. Починаючи з 1990 р. друком вийшло:

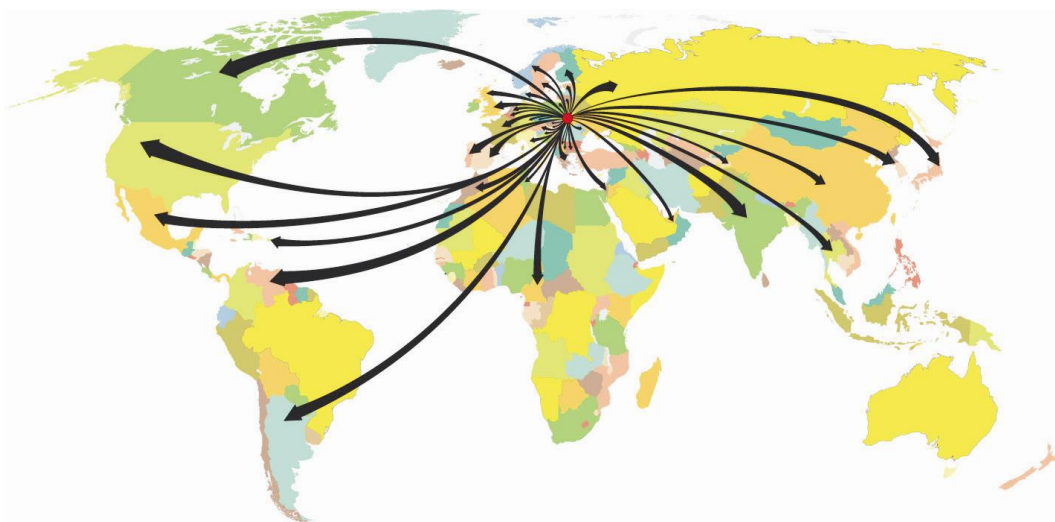
- *Друковані праці наукових співробітників Інституту фізики конденсованих систем НАН України. 1990-1993 роки*. – Львів, 1994. – 45 с. – Препринт ІФКС-94-21У;
- *Друковані праці співробітників Інституту фізики конденсованих систем НАН України. 1994-1996 роки*. – Львів, 1998. – 62 с. – Препринт ІФКС-98-01У;
- *Друковані праці співробітників Інституту фізики конденсованих систем НАН України. 1997-1999 роки*. – Львів, 2000. – 84 с. – Препринт ІФКС-00-17У;
- *Друковані праці співробітників Інституту фізики конденсованих систем НАН України. 2000-2002 роки*. – Львів, 2003. – 86 с. – Препринт ІФКС-03-06У;
- *Друковані праці співробітників Інституту фізики конденсованих систем НАН України. 2003-2005 роки*. – Львів, 2006. – 83 с. – Препринт ІФКС-06-13У;
- *Друковані праці співробітників Інституту фізики конденсованих систем НАН України. 2006-2008 роки*. – Львів, 2009. – 94 с. – Препринт ІФКС-09-04У.

ВИДАННЯ ІФКС НАН УКРАЇНИ



Журнал “Condensed Matter Physics” (CMP) – щоквартальний журнал, що видається з 1993 р. англійською мовою, у якому публікуються оригінальні та оглядові статті зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Головний редактор журналу – акад. НАН України І.Р.Юхновський, заступник головного редактора – чл.-кор. НАН України І.В.Стасюк, відповідальні секретарі редколегії – д.ф.-м.н. О.В.Пацаган, к.ф.-м.н. Я.М.Ільницький, технічний редактор – О.І.Мриглод. При журналі працює міжнародна редколегія, до складу якої входять провідні фахівці з дев’яти країн світу. Світовою також є географія авторів, що надсилають свої рукописи для опублікування у цьому журналі. Журнал визнано Європейським фізичним товариством, а з 2005 р. CMP включено до Філадельфійського списку наукових журналів та ряду сервісів Томсонівського інституту наукової інформації (Thomson ISI). В червні 2008 року

журнал став першим за часів незалежної України науковим періодичним виданням, яке отримало імпакт-фактор ISI. До усіх статей журналу є повнотекстовий доступ (<http://www.icmp.lviv.ua/journal/>).



*Географія авторів, що публікували статті у «Condensed Matter Physics».
Понад 52% авторів журналу – іноземці.*

Препринти ІФКС НАН України видаються з 1991 року. Електронна версія препринтів розміщена на Web-сторінці Інституту (<http://www.icmp.lviv.ua/>). Анотації препринтів є індексовані в базі даних ISI Web of Knowledge. За період 1999–2008 рр. вийшло друком 264 препринти, що охоплює усі напрямки наукових досліджень Інституту. Авторами препринтів ІФКС НАН України є як працівники Інституту, так і науковці інших установ України та з-за кордону.



Бібліотека ІФКС НАН України заснована у 1991 році і на сьогоднішній день нараховує понад 12 тисяч примірників наукової та навчальної літератури. Незмінним опікуном і головним бібліотекарем Інституту є Н.Я.Гривнак. У 2009 році при Інституті запрацювала електронна бібліотека, наповнення і роботу якої координує О.Я.Фаренюк.

КОНФЕРЕНЦІЇ, НАРАДИ, СЕМІНАРИ

Семінари Інституту

На регулярній основі працює науковий семінар ІФКС НАН України, що має великий авторитет у науковій спільноті і цікаві традиції, започатковані ще у 70-х роках. За цей час проведено більше 1000 таких семінарів (1000-й семінар відбувся у грудні 2005 р.), де свої результати мали змогу представити сотні вчених із десятків країн світу.



*Під час наукового семінару
Львівського відділу
Інституту теоретичної
фізики АН УРСР, 70-і роки.*

*Школа-семінар молодих
вчених зі статистичної
фізики і теорії
конденсованої речовини.
30-31 травня 2002 р.,
м.Львів.*



*Виїзне засідання
Бюро Відділення
фізики і астрономії
НАН України.
27 лютого 2002 р.
м.Львів.*

Інститут активно популяризує науку, проводячи наукові конференції, семінари, круглі столи та інші науково-популярні заходи. З часу створення Інституту організовано проведення більше **40** конференційних заходів різного рівня, Інститут виступив також співорганізатором понад **30** конференцій.

Традиційними стали такі **щорічні** Інститутські заходи як:

- **Ізингівські читання**

Присвячені актуальним проблемам теорії фазових переходів і критичних явищ, орієнтовані на наукову та студентську молодь. Лекторами на Ізингівських читаннях виступають провідні фахівці України та світу. За матеріалами читань у видавництві World Scientific започатковано серію “Order, Disorder and Criticality”, редактором якої є організатор читань – проф. Ю.В.Головач. Проводяться щорічно у травні, починаючи з 1997 р.

- **Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини** присвячений річниці створення першого відділу ІФКС НАН України – відділу СтеКС.

У рамках цієї школи-семінару провідні науковці України в галузі статистичної фізики читають лекції з актуальних питань сучасної теорії конденсованої речовини, а молоді вчені представляють свої наукові результати. До участі в роботі школи-семінару залучаються молоді науковці, студенти, аспіранти. Під час школи-семінару проводиться підсумковий етап конкурсу на здобуття індивідуальних премій для молодих науковців у галузі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Проводиться щорічно наприкінці травня – початку червня, починаючи з 2001 р.

- **Робоча нарада з актуальних проблем фізики м'якої речовини**

Організовується Науковою радою ВФА НАН України з проблеми “Фізика м'якої речовини”, базовою установою якої є ІФКС НАН України. Має на меті огляд та обговорення основних досягнень із певного напрямку фізики м'якої речовини. Проводиться щорічно в листопаді, починаючи з 2006 р.

- **Фестиваль науки в ІФКС НАН України**

Передбачає проведення низки заходів, що включають, зокрема, День відкритих дверей для студентів львівських вузів та учнів шкіл, науково-популярні доповіді запрошених фахівців інших спеціальностей, а також круглі столи та перегляди науково-популярних фільмів. Проводиться щорічно в травні, починаючи з 2007 р.

- **Йорданські читання**

В основу цих читань лягають наукові доповіді працівників ІФКС НАН України з представленням та обговорення найважливіших наукових результатів, що були отримані впродовж року. До участі в роботі Йорданських читань запрошуються також представники інших наукових установ та вищих навчальних закладів. Проводяться щорічно в січні, починаючи з 2006 року.

На періодичній основі Інститутом проводяться:

➤ **Чорнобильські читання**

Науковий семінар, що організовується раз на три роки і проводиться Інститутом спільно з Інститутом проблем безпеки атомних електростанцій НАН України за підтримки Національної академії наук України та Комітету з питань науки і освіти Верховної Ради України. Семінар присвячений обговоренню актуальних проблем вивчення фізико-хімічних процесів, що відбуваються в об'єкті "Укриття". Перший такий семінар відбувся у 2001 році.

➤ **Міжнародна конференція "Статистична фізика"**

Конференція присвячена сучасним проблемам у теорії конденсованої речовини, а також обговоренню перспектив застосувань теорії до вирішення актуальних прикладних задач. Традиція таких конференцій започаткована у 70-х роках минулого сторіччя і була згодом відроджена у Львові у 2005 р. Наступна така конференція запланована на червень 2009 року.



Серед інших міжнародних та всеукраїнських наукових конференцій, що були організовані Інститутом, починаючи із часу його створення, слід відзначити такі:

- Українсько-французький симпозіум "Конденсована матерія: наука та індустрія", Львів, лютий 1993 р.
- Науковий семінар "Єврогрант: Інформаційні технології і телекомунікації", грудень 1995 р.
- Міжнародна робоча нарада "Водні розчини: проблеми радіоактивного забруднення", грудень 1996 р.
- Боголюбівські читання у Львові, червень 1999 р.
- Міжнародна робоча нарада "Сучасні проблеми теорії м'якої речовини", серпень 2000 р.
- Круглий стіл "Інтернет як засіб комунікації в Україні", жовтень 2003 р.
- Міжнародна робоча нарада НАТО "Іонна м'яка речовина: новітні тенденції в теорії і застосуваннях", квітень 2004 р.
- Міжнародна робоча нарада НАТО "Ефекти розмірності і нелінійність у фероїках", жовтень 2004 р.
- Наукова сесія, приурочена Ювілейному 1000-му семінару ІФКС НАН України з фізики конденсованих середовищ, грудень 2005 р.
- Українсько-польська конференція з фізики сегнетоелектриків, вересень 2006 р.
- Меморіальні читання на пошану пам'яті академіка НАН України Олексія Ситенка, жовтень-листопад 2007 р.

КООРДИНАЦІЯ НАУКОВОЇ ДІЯЛЬНОСТІ

Наукова рада з проблеми “Фізика м’якої речовини”

З метою координації досліджень із фізики м'якої речовини постановою Президії НАН України № 143 від 31 травня 2000 року було створено Наукову раду з фізики рідкого стану, яка наприкінці 2004 року була реорганізована в Наукову раду з проблеми “Фізика м’якої речовини” при Відділенні фізики та астрономії НАН України. Інститут фізики конденсованих систем НАН України визначено базовою установою Ради.

Головою Ради є акад. НАН України І.Р.Юхновський, заступником – чл.-кор. НАН України М.Ф.Головко, секретарем – Т.М.Брик, членом Бюро ради – чл.-кор. НАН України І.М.Мриглов. Рада включає такі секції: статистична фізика, фізика рідкого стану, рідкі кристали, макромолекулярні та біологічні системи. До списку установ, діяльність яких у галузі фізики м’якої речовини координується Науковою радою, нині входять 20 установ НАН України та 9 вищих навчальних закладів МОН України. За спільною участю ради та дирекції ІФКС НАН України організовуються щорічні Робочі наради з актуальних проблем фізики м’якої речовини.

Інститут також координує дослідження за низкою інших наукових напрямків через:

- **Міжвідомчу наукову раду при Президії НАН України з проблеми “Фізика твердого тіла”:**
 - Секція “Теорія твердого тіла” (члени секції – акад. НАН України І.Р.Юхновський, чл.-кор. НАН України І.В.Стасюк);
 - Секція “Фізика сегнетоелектриків” (заст. голови секції – чл.-кор. НАН України І.В.Стасюк, член секції – Р.Р. Левицький);
 - Секція “Фізика високотемпературної надпровідності” (член секції – чл.-кор. НАН України І.В.Стасюк);
- **Бюро Відділення фізики і астрономії НАН України**
(член Бюро – чл.-кор. НАН України І.М.Мриглов);
- **Раду Західного наукового центру НАН та Міносвіти і науки України** (заступник голови ради – чл.-кор. НАН України І.М.Мриглов, голова секції фізики – чл.-кор. НАН України І.В.Стасюк);
- **Українське фізичне товариство** (Віце-президент товариства – чл.-кор. НАН України І.В.Стасюк);
- **Науково-технічну раду з проблеми “Оптичні захисні технології”**
(член ради – М.В.Шовгенюк);
- **Координаційну раду НАН України з питань інформатизації**
(член ради – І.А.Процикевич).

Працівники Інституту є: членами експертної ради з фізики (Т.М.Брик) при ВАК України, членами спеціалізованих рад із захисту докторських дисертацій в ІФКС НАН України, при Львівському національному університеті імені Івана Франка, в Інституті фізичної оптики МОН України, Прикарпатському національному університеті ім. В.Стефаника, в Українській академії друкарства; членами редколегій міжнародних наукових журналів: Phase Transitions, Central European Journal of Physics, Advances in Condensed Matter Physics, а також українських наукових журналів: Українського фізичного журналу, Condensed Matter Physics, Журналу фізичних досліджень, Фізичного збірника НТШ, Друкарського кур’єра.

МІЖНАРОДНЕ СПІВРОБІТНИЦТВО

Інститут має досвід міжнародної наукової співпраці із більше ніж **50** провідними дослідницькими центрами світу. Сьогодні в рамках двосторонніх угод про співробітництво та спільних наукових проектів ІФКС НАН України співпрацює із такими науковими установами:

- Інститут молекулярної фізики ПАН (Познань, Польща),
- Інститут теоретичної фізики Університету м.Лінц (Австрія),
- Університет імені П'єра і Марії Кюрі (Париж, Франція),
- Університет імені Анрі Пуанкаре (Нансі, Франція),
- Університет м.Джорджтаун (США),
- Університет м.Дортмунд (Німеччина),
- Інститут фізичної хімії ПАН (Варшава, Польща),
- Королівський технологічний інститут (Стокгольм, Швеція),
- Інститут хімічних процесів АН ЧР (Прага, Чехія),
- Університетом м.Любляна (Словенія),
- Університетом Парі-Сюд (Орсе, Франція),
- Університетом м.Рим "La Sapienza" (Італія).

Працівники Інституту проходять наукові стажування в:

- Університеті Британської Колумбії (Ванкувер, Канада),
- Університеті штату Арізона (США),
- Вищій нормальній школі (Ліон, Франція),
- Університеті Північної Кароліни (Шарлот, США),
- Національному інституті нанотехнологій (Едмонтон, Канада).

Гранти міжнародних організацій у 1999-2008 роках:

INTAS – 4 (1999, 2000, 2001, 2007-2008),
CRDF – 4 (2000 (2), 2002, 2006-2008),
УНТЦ – 8 (1999, 2000, 2001, 2002, 2003 (2), 2004, 2006-2008),
НАТО – 3 (2004 (2), 2008),
Eco-Net – 1 (2006),
МЦНК "Всесвітня лабораторія" – 1 (2005),
Фонд імені Гумбольдта – 2 (2006, 2007),
Грант Комітету наукових досліджень Польщі – 1 (2005-2008),
Національна стипендіальна програма Словаччини – 1 (2008),
Стипендія фонду ім. Марії Кюрі – 1 (2007).

Участь у роботі Міжнародних організацій, комітетів, редколегій:

- Європейська група з молекулярних рідин (чл.-кор. НАН України М.Ф.Головко);
- Міжнародний дорадчий комітет з проблеми “Домени в фероїках і мезоскопічні структури” (чл.-кор. НАН України І.В.Стасюк);
- Редколегія Phase Transitions (чл.-кор. НАН України І.В.Стасюк);
- Редколегія Central European Journal of Physics (чл.-кор. НАН України М.Ф.Головко, чл.-кор. НАН України І.М.Мриглод, А.М.Швайка);
- Редколегія Advances in Condensed Matter Physics (Ю.В.Головач, О.В.Держко).

У середньому за один рік:

- Інститут приймає 10-12 іноземних вчених;
- співробітники Інституту перебувають у 45-50 закордонних відрядженнях;
- публікується 35-40 статей у співавторстві із закордонними вченими;
- публікується біля 60-65 статей у провідних міжнародних виданнях;
- співробітники беруть участь у 20-30 міжнародних конференціях.

ІФКС НАН України відкритий до співпраці з усіх напрямків своєї спеціалізації. В останні роки тематика досліджень, що виконуються в Інституті, значно розширилася. Цікаві результати отримані, зокрема, з біофізики, нанофізики, фізики м'якої речовини, властивостей хімічно-активних систем, теорії складних мереж тощо. Нові перспективи досліджень відкриваються тепер у зв'язку із можливостями ширшого застосування методів комп'ютерного моделювання багатомасштабних процесів у складних системах і появою в Україні високопродуктивних розрахункових кластерів.

ІФКС НАН України веде активну роботу з підготовки молодих фахівців та наукових кадрів вищої кваліфікації. При Інституті працюють філія кафедри інженерного матеріалознавства та прикладної фізики і філія кафедри прикладної математики Національного університету “Львівська політехніка”, що структурно входять до нещодавно створеного Науково-навчального центру ЗНЦ НАН і МОН України. В Інституті створено спеціалізований комп'ютерний клас для навчання студентів, що дає змогу опановувати методи виконання складних комп'ютерних розрахунків. Працівники Інституту керують курсовими та магістерськими роботами, є науковими керівниками аспірантів і викладають спецкурси у вищих навчальних закладах Львова.

ЗМІСТ

Короткий літопис інституту	3
Із книги відгуків	5
Основні напрямки діяльності	6
Структура Інституту	7
Дирекція	8
Наукові відділи	10
ДП НТЦ "Українська академічна і дослідницька мережа"	
ІФКС НАН України	24
Основні наукові результати	26
Підготовка кадрів вищої кваліфікації	49
Педагогічна діяльність	50
Наукові публікації	51
Видання ІФКС НАН України	54
Конференції, наради, семінари	55
Координація наукової діяльності	58
Міжнародне співробітництво	59

Відповідальний редактор: І.М.Мриглод.

Укладачі проспекту: І.М.Мриглод, І.В.Стасюк, М.Ф.Головко, Р.С.Мельник, Т.М.Брик, М.П.Козловський, М.В.Токарчук, О.В.Держко.

Відповідальний за випуск: Р.С.Мельник.

Інститут фізики конденсованих систем НАН України
79011 м.Львів, вул. Свенціцького, 1
тел. (032) 2761978,
факс: (032) 2761158
ел.пошта: icmp@icmp.lviv.ua
<http://www.icmp.lviv.ua>

© Інститут фізики конденсованих систем НАН України, 2009