

КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ
ЛЬВІВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

РІЗДВЯНІ ДИСКУСІЇ 2020

ПРОГРАМА І ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Львів, 09–10 січня 2020 року

Ауд. 10 (вул. Драгоманова, 12)

РІЗДВЯНІ ДИСКУСІЇ 2020

09 січня 2020 року

Головуючий: **В. Ткачук**

10:00–10:20 *M. Zarichnyi*, Space of persistence diagrams in Topological Data Analysis

10:20–10:40 *О. Петрук*, Астрономія в українському середовищі Львова ХІХ та першої половини ХХ століття

10:40–11:00 *M. Samar*, Релятивістська задача Кеплера в просторі з мінімальною довжиною

11:00–11:20 *M. Tszih*, Machine learning and network analysis in studying large scale structure

11:20–12:00 Кава

12:00–12:20 *В. Ігнатюк*, Динамічні кореляції у відкритих квантових системах: модель з розфазуванням

12:20–12:40 *Yu. Kulnich*, Helium hydride ion in protogalaxy clouds: thermal emission vs. resonant scattering

12:40–13:20 *S. Kondrat*, Physics and modelling of intracellular diffusion (Tutorial lecture)

Головуючий: **О. Петрук**

15:00–15:20 *M. Maksymenko*, Physics-inspired training via the path in a hyperparameter space

15:20–15:40 *Yu. Honchar*, On the order of DNA thermal denaturation phase transition

15:40–16:00 *О. Григорчак*, δ - δ' -гребінка Дірака

16:00–16:20 *Ю. Тайстра*, Хвильова оптика у просторі Керра з врахуванням спін-спіральної взаємодії

16:20–17:00 Кава

17:00–17:20 *S. Kondrat*, Electrical double layers close to ionic liquid-solvent demixing

17:20–17:40 *В. Бешлей*, Криві блиску в гама-діапазоні молодих залишків наднових

17:40–18:00 *V. Shevchuk*, Analysis of ion migration in crystals with scheelite type structure using the topos calculation program

18:00–18:20 *В. Шевчук*, Про кінетику релаксації системи точкових дефектів у кристалах

10 січня 2020 року

Головуючий: **Б. Падляк**

10:00–10:20 *А. Дувіряк*, Радіаційне гальмування в середовищі фонового випромінювання

10:20–10:40 *А. Panasjuk*, On linear-quadratic Poisson pencils on central extensions of semisimple Lie algebras

10:40–11:00 *В. Novosyadlyj*, Hydrogen molecules in protogalaxy clouds: thermal emission vs. resonant scattering

11:00–11:20 *Х. Гнатенко*, Верхня межа для мінімального імпульсу та проблема футбольного м'яча у квантованому просторі

11:20–12:00 Кава

12:00–12:20 *Ю. Яремко*, Електричний диполь в електромагнітному полі

12:20–12:40 *Ya. Korduba*, Public transportation networks as complex systems: between data processing and statistical physics

12:40–13:00 *С. Смерчинський*, Мережа наукових зв'язків фізичного факультету ЛНУ імені Івана Франка

13:00–13:20 *Р. Неотенко*, Cosmological perturbations in dynamical non-minimally coupled dark energy

Головуючий: **Ю. Яремко**

15:00–15:20 *Р. Нрунів*, Inverse scattering for reflectionless Schrödinger operators and generalized KdV solitons

15:20–15:40 *Т. Кузюо*, Visualizations of three-dimensional MHD simulations of supernova remnants

15:30–16:00 *Х. Гайдуківська*, Розмірні характеристики складногалужених полімерів

16:00–16:20 *А. Кузьмак*, Визначення заплутаності системи кубітів на квантовому комп'ютері ibmq-ourense

16:20–17:00 Кава

17:00–17:20 *В. Padlyak*, Spectroscopic properties and possible application of the Nd-doped borate glasses

17:20–17:40 *В. Ткачук*, Від класичного біта до квантового

18:00–... Закриття

SPACE OF PERSISTENCE DIAGRAMS IN TOPOLOGICAL DATA ANALYSIS

Mykhailo Zarichnyi

Ivan Franko National University of Lviv

Topological Data Analysis (TDA) provides metric and topological structures for analyzing big data represented as point set in the euclidean spaces or more general metric spaces. This field emerged in the last decades and now finds numerous applications.

The persistent homology is one of the most important tools in TDA. The notion of persistent homology was introduced in [?]. To define the persistent homology, the data sets are endowed with metrics and there are different ways to make them families of simplicial complexes. The persistence diagrams are used to characterize persistent homology and thus to describe geometric properties of data. The set of all persistence diagrams can be endowed with different metrics. The most known are the Wasserstein metric and bottleneck metric.

We remark that the set of persistence diagrams can be naturally identified with the so called infinite symmetric product in the sense of Dold and Thom [?]. This allows us to introduce the strong topology on the set of persistence diagrams and show that this space is homeomorphic to the countable direct limit of euclidean spaces.

The metric spaces of persistence diagrams are object of considerations in numerous publications (see, e.g., [?, ?, ?]). The aim of the talk is to describe the topology of (completed) spaces of persistence diagrams by applying the technique from infinite-dimensional topology.

- [1] G. Carlsson, Bull. Am. Math. Soc. **46**, 255 (2009).
- [2] M. Carrière, M. Cuturi, S. Oudot, Sliced Wasserstein Kernel for Persistence Diagrams, Preprint; arXiv:1706.03358
- [3] A. Dold, R. Thom, Ann. Math. Second Ser. **67**, 239 (1958).
- [4] C. Li, M. Ovsjanikov, F. Chazal, in *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition* (2014), p. 1995.
- [5] Y. Mileyko, S. Mukherjee, J. Harer, Inv. Probl. **27**, 124007 (2011).

АСТРОНОМІЯ В УКРАЇНСЬКОМУ СЕРЕДОВИЩІ ЛЬВОВА ХІХ ТА ПЕРШОЇ ПОЛОВИНИ ХХ СТОЛІТТЯ

О. Петрук

Інститут прикладних проблем механіки і математики НАН України, Львів

Розповімо про те, як українські науковці, духовні особи та митці Львова розвивали, навчали та популяризували астрономію в окреслений період. Мова йтиме про професорів університету та політехніки, які викладали астрономію та мали вірогідно українське походження; про діяльність Наукового Товариства імені Шевченка в царині науки про небо, статті у “Збірнику математично-природописно-лікарської секції” Товариства; про лекції з астрономії, які організувало Товариство наукових викладів імені Петра Могили та діяльність Українського астрономічного кружка при цьому Товаристві; про науково-популярні книжкові видання астрономічної тематики (зокрема й перші українською мовою) та публікації у різноманітних періодичних виданнях; про зусилля окремих осіб, спрямовані на створення підручників та популяризацію цієї науки; про астрономічні мотиви чи сюжети у творчості відомих українських митців; про несподіване відношення до астрономії Галицьких митрополитів Григорія Яхимовича (1792–1863) та Андрея Шептицького (1865–1944).

РЕЛЯТИВІСТСЬКА ЗАДАЧА КЕПЛЕРА В ПРОСТОРИ З МІНІМАЛЬНОЮ ДОВЖИНОЮ

М. Самар

Кафедра теоретичної фізики,
Львівський національний університет імені Івана Франка

Запропоновано лоренц-коваріантну деформовану алгебру з мінімальною довжиною, яка в нерелятивістській границі прямує до недеформованої алгебри. Розглянуто задачу Кеплера в просторі з деформованими дужками Пуассона, що виникають в класичній границі лоренц-коваріантної деформованої алгебри. Як виявилось, слабкий принцип еквівалентності порушується в цьому випадку, оскільки кут прецесії кеплерівської орбіти залежить від маси частинки. Знайдено умову на параметр деформації, що відновлює слабкий принцип еквівалентності. На основі порівняння отриманих результатів з експериментальними даними для кута прецесії орбіти Меркурію отримано оцінку для мінімальної довжини.

MACHINE LEARNING AND NETWORK ANALYSIS IN STUDYING LARGE SCALE STRUCTURE

М. TsiZh

Ivan Franko National University of Lviv

We provide a short review of application of machine learning methods in cosmology and, in particular, in large scale structure analysis. The typical problems which are solved by machine learning are: objects (typically, galaxies) classification, restoration and prediction of objects characteristics, restoration and prediction of matter distribution and others. We will also take a look at arising new application of complex network analysis in this field.

As example we will show results we've obtained in exploring topological structures in simulated Λ CDM, which was performed by authors of [?]. We used a set of network metrics computed for considered Cosmic Web as feature variable of machine learning model. This set includes: (node degree, average neighbour degree, Katz, betweenness, closeness, harmonic and eigen centralities, triangles, clustering coefficient and squares of node). We used extreme gradient boosting decision trees method (also known as xgboost [?]) of machine learning to restore the topological index of each halo, which was initially computed using CLASSIC topology classifier [?]. We've restored topology with moderate success with these tools, having prediction score of 70 %. We discuss its possible further application for study of large scale structures of Universe.

- [1] N. Libeskind, *Mon. Not. Roy. Soc.* **473**, 1195 (2018).
- [2] O. Hahn, C. Porciani, C. M. Carollo, A. Dekel, **375**, 489 (2007); <https://arxiv.org/abs/astro-ph/0610280>.
- [3] T. Chen, C. Guestrin, in *KDD '16 Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, (2016), p. 785; <https://arxiv.org/abs/1603.02754>.

ДИНАМІЧНІ КОРЕЛЯЦІЇ У ВІДКРИТИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМАХ: МОДЕЛЬ З РОЗФАЗУВАННЯМ

В. Ігнатюк

Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Квантове керуюче рівняння (*quantum master equation*) отримано методом нерівноважного статистичного оператора [1], коли до складу динамічних змінних скороченого опису разом з операторами $\hat{X}_{mn} = |m\rangle\langle n|$, що характеризують стан кубіта (S), включається оператор \hat{V}_{int} енергії взаємодії між кубітом та його оточенням (E). Таке рівняння є нелокальним у часі та містить кореляційну “квазітемпературу” $1/\beta(t)$, яка є нерівноважним параметром стану, термодинамічно спряженим до середньої енергії взаємодії повної ($S + E$) системи. З використанням законів збереження отримано рівняння для $\beta(t)$, яке має вигляд нерівноважного рівняння стану, де роль узагальненої питомої теплоємності відіграють кореляційні функції “енергія-енергія”.

Для верифікації запропонованого методу вибрано модель з розфазуванням [2], яка допускає точні розв’язки для цілої низки початкових умов [3-5], що реалізуються в рамках того чи іншого квантового вимірювання. Отримано немарківські кінетичні рівняння для узагальненої когерентності системи та квазітемператури, які дозволяють ефективно описувати динамічні кореляції. Оскільки такі рівняння є сильно нелінійними за спостережуваними величинами, здійснено діагональне наближення за множниками Лагранжа.

Отримано [6] аналітичні (у марківському наближенні) та числові розв’язки кінетичних рівнянь, які дозволили: i) дати фізичну інтерпретацію квазітемпературі як нерівноважній поправці до температури термостата; ii) показати, що врахування динамічних кореляцій не міняє модуля когерентності, а приводить лише до перерозподілу компонент вектора Блоха у горизонтальній площині (таким чином, динамічні кореляції спричиняють перенормування власної частоти кубіта); iii) провести певні аналогії з квантовою кінетикою багаточастинкових систем [7,8] та проаналізувати природу відмінностей, специфічних для відкритих квантових систем.

Крім того, розглядається можливість введення нового критерію немарковості відкритих квантових систем на основі узагальненої термодинаміки.

- [1] V. Morozov, V. Ignatyuk, *Particles* **1**, 285 (2018).
- [2] J. Luczka, *Physica A* **167**, 919 (1990).
- [3] V.G. Morozov, S. Mathey, and G. Röpke, *Phys. Rev. A* **85**, 022101 (2012).
- [4] V. V. Ignatyuk, V. G. Morozov, *Phys. Rev. A* **91**, 052102 (2015).
- [5] V. V. Ignatyuk, *Phys. Rev. A* **92**, 062115 (2015).
- [6] V.V. Ignatyuk, *Open Syst. Inf. Dyn.*; submitted.
- [7] D. N. Zubarev, V. Morozov, G. Röpke, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes, Vol. 1, Basic Concepts, Kinetic Theory*, (Akademie Verlag, 1996).
- [8] V. G. Morozov, G. Röpke, *Journ. Stat. Phys.* **102**, 285 (2001).

HELIUM HYDRIDE ION IN PROTOGALAXY CLOUDS: THERMAL EMISSION VS. RESONANT SCATTERING

Yu. Kulinich, B. Novosyadlyj

Astronomical Observatory of Ivan Franko National University of Lviv

In astrophysics, the interest in the helium hydride ion, HeH^+ , discovered in the lab in 1925, is caused by its stability in the cosmic isolation and by its composition, since it consists of the most widespread atoms in the Universe - hydrogen and helium. It is not surprising that numerous discussions about the formation of this molecule and its search both in the Galaxy and the deep space have been undertaken since the 70s of the last century. Unfortunately, the HeH^+ detection has not directly been confirmed for a long time and only recently the first reliable confirmation of the HeH^+ , existence towards the planetary nebula NGC 7027 has been obtained. Molecule HeH^+ plays a significant role in the emerging of first stars at the end of Dark Ages since it is one of the first molecules to appear in the early Universe among with H_2 , HD, LiH, and their ions. Molecules are known to be the only obvious coolants for baryon matter in the early Universe at temperatures below $\sim 8000\text{ K}$ because then there was nothing else to do that. These molecules can emit radiation away, causing the proto-star clouds of gas to cool and keep collapsing to allow first stars creation at the end of dark ages. In particular, molecules HeH^+ should be effectively cooled by emitting of radiation due to the large value of their electric dipole moment, 1.722 D, and should be present predominantly in the ground and low-lying rotational excited states. The population of HeH^+ by its ground and excited rotational states as well as the flux of its emission and/or absorption spectrum in the epoch of dark ages is defined by collisions with photons of the cosmic microwave background¹ (CMB), free electrons and neutral atoms of hydrogen. Calculations for rotational and vibrational excitations/de-excitations rates for electron- HeH^+ collisions were performed by Rabadan et al. (1998); Hamilton et al. (2016); Curik & Greene (2017); Khamesian et al. (2018). However, up to date, there are no estimates for HeH^+ rotational excitations/de-excitations by collisions with neutral hydrogen.

The potential energy surface (PES) for H- HeH^+ collisions in analytical and numerical approximations is obtained. The state-to-state integral cross sections for rotational transitions during H- HeH^+ collisions are obtained and corresponding rate coefficients are calculated. The role of collisional excitations of low-lying rotational levels of HeH^+ in Dark Ages is discussed as on the cosmological background and inside evolutionary proto-halos and virialized halos. The thermal and resonance dark ages halos brightnesses were obtained in rotational levels of the helium-hydride molecular ion, HeH^+ .

PHYSICS AND MODELLING OF INTRACELLULAR DIFFUSION

S. Kondrat^{1,2}

¹Institute of Physical Chemistry, Warsaw, Poland

²Forschungszentrum Jülich, Germany

Diffusion is a fundamental phenomenon that occurs ubiquitously in nature and remains the subject of continuous research interest. Understanding diffusion is a key to understanding living systems. In this lecture, I discuss diffusion of macromolecules under crowding conditions akin of living cells. I will describe briefly how to characterize, model and measure diffusion properties. The focus will be on physics and simulations, with a particular emphasis on the effects important for crowded, biologically relevant systems [1].

[1] S. Kondrat, in *Physics of Life, 49th IFF Spring School 2018, Series: Key Technologies, Vol. 158*, (Forschungszentrum Jülich Publishing); <https://arxiv.org/abs/1810.05496v1>.

PHYSICS-INSPIRED TRAINING VIA THE PATH IN A HYPERPARAMETER SPACE

M. Maksymenko
SoftServe

Efficient search for optimal hyperparameters is essential for training deep architectures and is a core part of any AutoML pipeline. Typical approaches, however, are far from being optimal and rely on repeated sampling of hyperparameter space or greedy search for the best set of hyperparameters. In our approach [1], we train models in a combined weight-hyperparameter space resulting in optimal scheduling protocol (path) for hyperparameters. Our algorithm is based on the physical intuition of interpreting hyperparameters as an effective temperature controlling noise in the system and requires only negligible computational cost in comparison to parallel grid approaches.

This leads to faster training times and improved resistance to overfitting and show a systematic decrease in the absolute validation error, improving over benchmark results.

[1] <https://arxiv.org/abs/1909.04013>.

ON THE ORDER OF DNA THERMAL DENATURATION PHASE TRANSITION

Yulian Honchar^{1,2}, Christian von Ferber^{3,2}, Yuriy Holovatch^{1,2,3}

¹Institute for Condensed Matter Physics, NAS of Ukraine, Lviv

² \mathbb{L}^4 Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems,
Leipzig–Lorraine–Lviv–Coventry, Europe

³Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry, United Kingdom

The Poland-Sheraga model suggested in mid-sixties of the last century is used to explain the process of DNA thermal denaturation (unbinding of a double helix into two separate strands) in analogy to the temperature-induced phase transition [?]. It has been shown that the order of such transition is determined by an exponent c that describes a part of a macromolecular chain containing an unbounded loop. The exponent is universal and is expressed in terms of the exponents that govern scaling properties of polymers in solvent and take into account solvent quality as well as possible affects of self- and mutual interactions within DNA strands. These scaling exponents are usually identified through parametric expansions in renormalization group method. In this work we analyze $\varepsilon = (4 - d)$ -expansion for scaling exponents describing thermal denaturation of DNA in $d = 3$ dimensions [?]. To enhance convergence of the perturbative expansion, we use the resummation procedure based on the conformal mapping of a plane with a cut along the negative semi-axis onto a disc [?]. Our results show that the phase transition of thermal denaturation of DNA is indeed of the first order. Moreover, studied effects significantly influence the strength of the first order transition.

[1] D. Poland, H. A. Sheraga, J. Chem. Phys. **45**, 1464 (1966).

[2] V. Schulte-Frohlinde, Yu. Holovatch, C. von Ferber, A. Blumen, Phys. Lett. A **328**, 335 (2004).

[3] Yu. Honchar, Scaling Laws for DNA Thermal Denaturation (Master's Thesis) (National University of Kyiv-Mohyla Academy, Kyiv, 2019).

δ - δ' -ГРЕБІНКА ДІРАКА

О. І. Григорчак, В. С. Пастухов

Кафедра теоретичної фізики,
Львівський національний університет імені Івана Франка

Питання розв'язку рівняння Шредінгера з δ' -потенціалом дискутується доволі давно, зокрема через наявність різних понять, які “ховаються” за словосполученням δ' -потенціал. Це, у свою чергу, породжує різні процедури регуляризації, що приводить до різних значень фізично спостережуваних величин. Внести ясність у цю ситуацію дозволив підхід, в якому означення δ' -потенціалу пов'язується з граничними умовами в точці сингулярності, а не з процедурою регуляризації. Опіраючись на цей підхід, ми розглянули модель δ - δ' -гребінки Дірака зі скінченною кількістю “зубців”, обмеженої з обох сторін потенціалом сталої величини. Для такої системи ми знайшли дисперсійне співвідношення, а також залежність границь зон і величини енергії поверхневих рівнів від параметрів, які стоять перед δ і δ' -функціями у рівнянні Шредінгера.

ELECTRICAL DOUBLE LAYERS CLOSE TO IONIC LIQUID-SOLVENT DEMIXING

S. Kondrat

Institute of Physical Chemistry, Warsaw, Poland

There is growing interest to the properties of ionic liquids (ILs) at metallic interfaces. The main focus so far has been on electrical double layers (EDLs) with ILs far from phase transitions, while EDLs with ionic liquid-solvent mixtures (ILSMs) in the proximity to their phase separation received virtually no attention. In this contribution, I describe a simple mean-field model suitable for IL-solvent close to demixing, in which we took into account dispersion interactions [1], often neglected in theoretical approaches. I will show the emergence of a ‘bird-shaped’ capacitance, in addition to the extensively studied camel and bell shapes. Remarkably, the camel-shaped capacitance, which is a signature of dilute electrolytes, can be obtained also at high concentrations in the vicinity of demixing [2]. We also find that the energy stored in an EDL increases appreciably as the system approaches demixing, which can be utilized for generating electricity from waste heat [1, 2].

[1] C. Cruz, A. Ciach, E. Lomba, S. Kondrat, J. Phys. Chem. C **123**, 1596 (2019).

[2] C. Cruz, S. Kondrat, E. Lomba, A. Ciach, Effect of proximity to ionic liquid-solvent demixing on electrical double layers (2019), submitted.

ХВИЛЬОВА ОПТИКА У ПРОСТОРІ КЕРРА З ВРАХУВАННЯМ СПІН-СПІРАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

В. О. Пелих¹, Ю. В. Тайстра^{1,2}

¹Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАНУ, Львів

²Національний університет “Львівська політехніка”, Львів

Ми застосовуємо алгебраїчно-спеціальний вихідний в сенсі Чандрасекара розв'язок рівнянь Максвелла у просторі Керра, отримуємо вирази хвильових векторів право- та лівополяризованих хвиль і доводимо, що з умови ізотропності як умови рівності нулевих інваріантів поля не впливає ізотропність хвильових векторів, а також, що інтегральна конгруенція хвильового векторного поля не є геодезійною. Ми встановлюємо зв'язок отриманих результатів із умовою Старобінського та Пресса-Тюкольського існування супервипромінювання в просторі-часі Керра.

ANALYSIS OF ION MIGRATION IN CRYSTALS WITH SCHEELITE TYPE STRUCTURE USING THE TOPOS CALCULATION PROGRAM

V. N. Shevchuk, I. V. Kayun

Department of Electronics and Computer Technologies,
Ivan Franko National University of L'viv

The crystals with scheelite-type structure are important as widely known modern materials science and as work elements in detector systems. But electrical properties of the AMO_4 (where A is Ba, Ca, Pb, or Sr, and M is Mo, or W) crystals with scheelite-type structure are investigated very not enough. The mechanism of ionic conductivity and the migration paths of the likely mobile ions in the AMO_4 crystals are not ascertained problems.

The electrical properties of tungstate crystals of divalent metal ions were investigated in our works [1–3]. In the calculation papers [4–6] were presented the some first visualization data of migration way of ions Mo or W by using of the TOPOS program. The visualization of possible migration ways of ionic charge carriers is important method for the determination of micro-mechanism of theirs move through crystalline lattice. But the calculation of probable migration way of the ion M in AMO_4 crystals at this period are only as first step of such investigation.

For ion migration modeling and for visualization ion pathways in different oxides utilized *ab initio* techniques (see e. g. the brief reviews in the ref. [5], [7], and [8]). In the works [7, 8] *the procrystal analysis* is presented as a valuable tool for visualization of ion migration pathways in solids. In the present study, using the program package TOPOS [9] the analysis of microstructure of migration ways of W ions in the AMO_4 is devoted to the calculation and construction of the W-migration path.

In the paper were considered a sizeable of the published X-ray structural data on AMO_4 and our previous X-ray results. We considered the W-migration ways and a temperature change of characteristic elementary parameters of the cationic transference specifically the length of elementary channels. The calculated migration channels were analyzed with variation of unit cell parameters of compounds and cation substitutions influence to the elementary channel lengths.

- [1] V. N. Shevchuk, I. V. Kayun, Acta Phys. Polon. A **117**, 150 (2010).
- [2] V. N. Shevchuk, I. V. Kayun, Func. Mater. **18**, 165 (2011).
- [3] В. Н. Шевчук, *Особливості електропереносу в кристалах складних окислів* (ЛНУ ім. І. Франка, Львів, 2018).
- [4] V. N. Shevchuk, I. V. Kayun, in *Proc. Int. Conf. Oxide Materials for Electronic Engineering - fabrication, properties and applications OMEE-2014* (Publ. House of Lviv Politechnic, 2014), p .117.
- [5] V. N. Shevchuk, I. V. Kayun, Chem. Metal. Alloys **9**, 128 (2016).
- [6] V. N. Shevchuk, I. V. Kayun, in *Proc. XI-th Int. Scint and Pract. Conf. Electronics and Informattion Technologies ELIT-2019* (Ivan Franko National University of Lviv, 2019), p. 238.
- [7] M. O. Filsoe, E. Eikeland, B. B. Iversen, in *Proc. AIP Conf. 1765* (AIP Publ., 2016), p. 020010.
- [8] M. O. Filsoe *et al.*, Chem. Europ. J. **19**, 15535 (2013).
- [9] V. A. Blatov, IUCr Comp. Comm. Newsletter **7**, 4 (2006). – Vol. 7. – P. 4-38.

КРИВІ БЛИСКУ В ГАМА-ДІАПАЗОНІ МОЛОДИХ ЗАЛИШКІВ НАДНОВИХ

В. Бешлей¹, О. Петрук¹, В. Марченко², М. Патрій³

¹Інститут прикладних проблем механіки і математики НАН України, Львів,

²Астрономічна обсерваторія Ягеллонського університету, Краків,

³Фізичний факультет ЛНУ імені Івана Франка, Львів

2008 року було запущено космічну гама-обсерваторію ім. Фермі, яка почала вести спостереження в діапазоні енергій квантів від 0.1 до 300 GeV, що дозволяє робити важливі висновки про умови випромінювання космічних променів високих енергій. Особливістю цієї обсерваторії є те, що вона проводить моніторинг усього неба, а не спостерігає лише конкретне джерело.

Метою нашої роботи є пошук часових варіацій потоків GeV-ного випромінювання від молодих залишків наднових (ЗН). А саме, ми аналізуємо, в єдиному підході, GeV-не випромінювання від історичних ЗН, віком до тисячі років, а саме: SN1987A, G1.9+0.3, Кассіопея А, ЗН Кеплера, ЗН Тихо Браге, та SN1006. Нас цікавить випромінювання елементарних часток, прискорених на ударних хвилях, тому ми розглядатимемо лише оболонкові ЗН, а не ті історичні ЗН, в яких домінує випромінювання пульсару (Крабовидна туманність та 3C58).

У роботі побудовано криві блиску в GeV-ному діапазоні від чотирьох залишків наднових зір, а саме: SN1987A, Кассіопея А, ЗН Тихо Браге та SN1006. Аналізувалося також випромінювання з областей G1.9+0.3 та ЗН Кеплера, проте космічна гама-обсерваторія ім. Фермі не детектувала їх.

ПРО КІНЕТИКУ РЕЛАКСАЦІЇ СИСТЕМИ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛАХ

В. Шевчук

Факультет електроніки та комп'ютерних технологій,
Львівський національний університет імені Івана Франка

У праці під кутом зору дослідження власнодефектного розупорядкування ґратки та його впливу на фізичні властивості кристалів експериментально вивчаються температурні зміни електричних та діелектричних параметрів вольфраматів двовалентних металів (Ca, Pb, Cd, Zn) як відомих люмінесцентних матеріалів з короткочасовим випромінюванням. Вказані зміни, за припущенням, зумовлені варіаціями співвідношень концентрацій електрично активних дефектів, або їх перетворень: групування/розпад комплексів дефектів, зміна зарядового стану точкових дефектів, їх локалізація/делокалізація тощо. Розглядаються також часові залежності властивостей при фіксованих температурах зразка як прояв самоорганізації у системі дефектів і переходу її у квазірівноважний стан.

Показано, що діелектричні властивості кристалів PbWO₄ (структурний тип шееліт) проявляють певну періодичність відтворюваності числових значень (період близько 24 год при 290 K). Аналізується зв'язок таких явищ періодичності з динамікою ґраткових дефектів (точкових та лінійних — дислокацій, які несуть заряд) та їх взаємодією. Спостерігаються швидкі (після зняття збуджуючого чинника) та тривалі релаксаційні процеси. Вперше ці ефекти стосовно діелектричних властивостей описані в працях [1, 2]. У той час кристал CdWO₄ (структурний тип вольфрамат) за умов досліджень (температури до 600 K) такою властивістю періодичного повторення значень на кривих залежності діелектричної проникності від часу не володіє. Термодіелектричний ефект, як це у випадку PbWO₄ [3], також відсутній.

Обговорювані релаксаційні зміни мають першорядне значення у процесах відновлення вихідних параметрів кристалу та його підготовки до наступного акту збудження. Виявлені квазіперіодичні явища у кристалах PbWO₄ можна задовільно описати [1, 4] в рамках математичної

моделі, вперше запропонованої Ю.Гірняком [5] при аналізі кінетичних процесів у хімічних реакціях та обґрунтуванні ним періодичного закону зміни концентрацій реагентів. Зазначимо, що процеси самоорганізації в твердому тілі, супроводжувані періодичністю зміни властивостей, лише останнім часом стали цікавити дослідників (див., напр., [6]), хоча мають важливе значення при застосуванні.

- [1] V. N. Shevcuk, I. V. Kayun, Phys. Solid State **47**, 632 (2005).
- [2] V. N. Shevcuk, I. V. Kayun, Funct. Mater. **18** 165 (2011).
- [3] V. N. Shevcuk, I. V. Kayun, Radiat. Meas. **42**, 847 (2007).
- [4] В. Н. Шевчук, Юліан Гірняк - український вчений, відомий у світі і забутий на батьківщині;astro.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2017/.../Julian-Hirniak-UKU.pdf.
- [5] Ю. Гірняк, Зап. мат.-природопис.-лік. сек. НТШ **12**, 1 (1908).
- [6] V. S. Khmelevskaya, Soros Educ. J. **6**, 85 (2000).

РАДІАЦІЙНЕ ГАЛЬМУВАННЯ В СЕРЕДОВИЩІ ФОНОВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

А. Дувіряк

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів

Заряджена частинка, що рухається з прискоренням, випромінює електромагнетне поле і відчуває реакцію цього поля. Причиною прискорення може бути взаємодія із зовнішніми електромагнетними хвилями. Розглядається сила, що виникає внаслідок розсіяння зарядом електромагнетних хвиль теплового фону. Її треба враховувати поряд з реакцією власного випромінювання частинки. Для ілюстрації розглядається рух релятивістичної зарядженої частинки у сталому магнетному полі з врахуванням обидвох сил гальмування. Задачу розв'язано у квадратурах. Показано, що частинка локалізується у скінченній області простору.

ON LINEAR-QUADRATIC POISSON PENCILS ON CENTRAL EXTENSIONS OF SEMISIMPLE LIE ALGEBRAS

Andriy Panasyuk, Vsevolod Shevchishin

University of Warmia and Mazury, Olsztyn, Poland

In a recent paper Vladimir Sokolov introduces a three-parametric family of quadratic Poisson structures on $\mathfrak{gl}(3)$ each of which is compatible with the canonical linear Poisson bracket. The complete involutive family of polynomial functions related to these bi-Poisson structures contains the Hamiltonian of the so-called elliptic Calogero–Moser system, the quantum version of which is also discussed in the same paper.

We show that there exists a 10-parametric family of quadratic Poisson structures on $\mathfrak{gl}(3)$ compatible with the canonical linear Poisson bracket and containing the Sokolov family. Possibilities of generalization to other Lie algebras and quantization matters will be also touched in this talk.

HYDROGEN MOLECULES IN PROTOGALAXY CLOUDS: THERMAL EMISSION VS. RESONANT SCATTERING

B. Novosyadlyj, Yu. Kulinich

Astronomical Observatory of Ivan Franko National University of Lviv

The emission from dark ages halos (protogalaxies) in the lines of transitions between the lowest rotational levels of hydrogen (H_2) and hydrogen deuteride (HD) molecules is analyzed. It is assumed that molecules are excited by the cosmic microwave background (CMB), radiation of first sources of light and collisions with hydrogen atoms. The physical parameters of halos and the number density of molecules are precalculated in assumption that they are homogeneous top-hat spheres formed from the cosmological density perturbations in the four-component Universe with post-Planck cosmological parameters. The differential brightness temperatures and differential spectral fluxes in the rotational lines of H_2 /HD molecules are computed for thermal luminescence of forming protogalaxies and resonant scattering of CMB radiation by moving ones with peculiar velocity defined by cosmological perturbations. The results show that expected maximal values of differential brightness temperature of warm halos ($T_K \sim 200\text{--}800$ K) are at the level of nanokelvins, are comparable for both phenomena, and are below a sensitivity of modern sub-millimeter radio telescopes. For hot halos ($T_K \sim 2000\text{--}5000$ K) the thermal emission of H_2 -ortho molecules dominates and the differential brightness temperatures are predicted to be of a few microkelvins at the frequencies 300–600 GHz. All halos become luminous in the lines of HD molecule in the Cosmic Dawn epoch when the density of radiation from the first sources of light reaches thousandth of the density of CMB. They can be detectable with telescopes of a new generation.

ВЕРХНЯ МЕЖА ДЛЯ МІНІМАЛЬНОГО ІМПУЛЬСУ ТА ПРОБЛЕМА ФУТБОЛЬНОГО М'ЯЧА У КВАНТОВАНОМУ ПРОСТОРИ

Х. Гнатенко

Кафедра теоретичної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка

Розв'язано проблему опису руху макроскопічного тіла, відому, як проблему футбольного м'яча [1,2], в рамках сферично-симетричної та інваріантної відносно інверсії часу некомутативної алгебри [3]. Встановлено, що дослідження руху макроскопічних тіл у квантованому фазовому просторі дозволяють отримати строгі оцінки для мінімального імпульсу [4].

Знайдено розв'язок проблеми макроскопічних тіл у квантованому просторі з деформованими комутаційними співвідношеннями для координат та імпульсів у випадку довільної функції деформації. Показано, що у всіх порядках за параметрами деформації координати та імпульси центра мас задовольняють деформовану алгебру, зберігаються властивості кінетичної енергії та слабкий принцип еквівалентності, коли параметр деформації є обернено пропорційний до маси [5].

[1] S. Hossenfelder, Phys. Rev. D **75**, 105005 (2007).

[2] G. Amelino-Camelia, Symmetry **2**, 230 (2010).

[3] Kh. P. Gnatenko, M. I. Samar, V. M. Tkachuk, Phys. Rev. A **99**, 012114 (2019).

[4] Kh. P. Gnatenko; arXiv:1909.06295.

[5] Kh. P. Gnatenko, V. M. Tkachuk, arxiv:1907.07057 (to appear in Mod. Phys. Lett. A 2020).

ЕЛЕКТРИЧНИЙ ДИПОЛЬ В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ

Ю. Яремко

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів

Досліджена динаміка нерелятивістського електричного диполя в однорідному статичному електромагнітному полі [1]. З перших принципів (збереження енергії, імпульсу та баланс моменту імпульсу) отримані рівняння руху. Показано, що вони утворюють гамільтонову систему з п'ятьма ступенями вільності (трьома трансляційними та двома обертальними) та з виродженою пуассоновою структурою. В загальному випадку динаміка хаотична. За допомогою чисельних алгоритмів, застосованих до розв'язання нелінійних рівнянь руху, побудовані траєкторії диполя для низки початкових умов. Показано, що на форму траєкторії центра мас частинки суттєво впливає її обертання, спричинене взаємодією \mathbf{z} -вектора дипольного моменту із електричним полем.

[1] M. Przybylska, A. J. Maciejewski, Yu. Yaremko, Proc. R. Soc. A **475**, 20190230 (2019).

PUBLIC TRANSPORTATION NETWORKS AS COMPLEX SYSTEMS: BETWEEN DATA PROCESSING AND STATISTICAL PHYSICS

Yaryna Korduba^{1,2}, *Robin de Regt*^{3,4}, *Yurij Holovatch*^{4,2,3}

¹Ukrainian Catholic University, Lviv, Ukraine,

²L⁴ Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems,
Leipzig–Lorraine–Lviv–Coventry, Europe

³Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, Coventry, United Kingdom ⁴Institute
for Condensed Matter Physics, NAS of Ukraine, Lviv

The objective of our study is to demonstrate how the physical perspective enriches the usual statistical analysis when dealing with a complex system of many interacting agents of non-physical origin [?]. To this end, we discuss the quantitative analysis of some urban public transportation networks (PTNs) viewed as complex systems. We investigate and compare the PTNs in terms of their main topological features and operational stability [?, ?]. We apply a multi-disciplinary approach by integrating methods in both data processing and statistical physics to investigate the correlation between public transportation network topological features and their operational stability. We review some of the previously obtained results [?] together with the new data, mainly for PTNs of Lviv and Bristol [?]. The studies incorporate concepts of coarse-graining and clusterization, universality and scaling, stability and percolation behavior, diffusion, and fractal analysis.

[1] Yu. Holovatch, R. Kenna, S. Thurner, Eur. Journ. Phys. **38**, 023002 (2017); arXiv:1610.01002.

[2] R. de Regt, C. von Ferber, Yu. Holovatch, M. Lebovka, Transportmetrica A: Transport Sci. **15**, 722 (2019); arXiv:1705.07266.

[3] Ya. Korduba, R. de Regt, Yu. Holovatch, Ann. UMCS A **LXXIV**, 65 (2019); arXiv:1911.10858.

МЕРЕЖА НАУКОВИХ ЗВ'ЯЗКІВ ФІЗИЧНОГО ФАКУЛЬТЕТУ ЛНУ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

С. В. Смерчинський, С. В. Андрухович, М. Я. Слюсар

Кафедра астрофізики, Львівський національний університет імені Івана Франка

В нашій роботі ми спробували побудувати та дослідити мережу наукових зв'язків викладачів фізичного факультету. Мережа створювалась за наступним принципом: працівникам факультету відповідають вузли, а зв'язки між ними — це спільні статті.

За основу для побудови графів було використано Google Scholar, оскільки ця база даних статей, опублікованих у наукових виданнях, містить більшу кількість публікацій викладачів, ніж, напр. Scopus. З цієї причини вважаємо, що граф, створений на основі обраної бази даних, краще відображає мережу наукових зв'язків між структурними одиницями, хоча, можливо, при цьому втрачається інформація про якість наукової співпраці. Крім цього, в нашій роботі ми проаналізували лише наукові публікації працівників за останні п'ять років.

Нами побудовані мережі наукових зв'язків як фізичного факультету в цілому, так і для кожної з шести кафедр факультету окремо. З одного боку, це дало змогу проаналізувати наукові зв'язки факультету з іншими структурними одиницями Львівського національного університету імені Івана Франка та науковими установами України і закордону. А з іншого боку, отримати інформацію про те, як розподілена наукова робота в межах кафедри, а також про існування наукових груп як на окремій кафедрі, так і міжкафедральних.

COSMOLOGICAL PERTURBATIONS IN DYNAMICAL NON-MINIMALLY COUPLED DARK ENERGY

R. Neomenko

Ivan Franko National University of Lviv

We study the evolution of cosmological perturbations in the model of Universe with presence of non-gravitational interaction between dynamical dark energy and cold dark matter. Such model of dark energy in comparison with dark energy with constant equation of state parameter $w = p_{de}/\rho_{de}$ is more general and allows us also to avoid non-adiabatic large-scale instabilities at radiation dominated epoch. For DE-DM interactions, linearly depended on energy densities of dark components, the conditions for arising of these instabilities were derived. Using the numerical solutions of equations for evolution of cosmological perturbations the behaviour of these perturbations are studied for different values of interaction parameter.

INVERSE SCATTERING FOR REFLECTIONLESS SCHRÖDINGER OPERATORS AND GENERALIZED KDV SOLITONS

Rostyslav Hryniv^{1,2}

¹Ukrainian Catholic University, Lviv, Ukraine,

²Ivan Franko National University of Lviv

In this talk, we discuss Schrödinger operators on the line with real-valued integrable reflectionless potentials q ,

$$S_q := -\frac{d^2}{dx^2} + q.$$

In particular, we give a complete characterization of such operators in terms of their scattering data, sequences of eigenvalues and norming constants, and suggest an explicit formula producing all such

potentials, thus completely solving the related direct and inverse scattering problems. Using the inverse scattering transform approach [?], we then describe all solutions of the Korteweg–de Vries (KdV) equation whose initial profile is an integrable reflectionless potential. Such solutions stay integrable and reflectionless for all $t \geq 0$ and can be called *generalized soliton solutions* of the KdV.

This research extends and specifies in several ways the previous work on reflectionless potentials [?, ?] and generalized soliton solutions of the KdV equation [?, ?]. The talk is based on a joint project with Ya. Mykytyuk (Lviv Franko National University, Ukraine).

- [1] C. S. Gardner, J. M. Green, M. D. Kruskal, R. M. Miura, Phys. Rev. Lett. **19**, 1095 (1967).
- [2] F. Gesztesy, W. Karwowski, Z. Zhao, Duke Math. J. **68**, 101 (1992).
- [3] I. Hur, M. McBride, C. Remling, Trans. Am. Math. Soc. **368**, 1251 (2016).
- [4] V. A. Marchenko, in *What is integrability?* (Springer Ser. Nonlinear Dynam., Springer, Berlin, 1991), p. 273.

VISUALIZATIONS OF THREE-DIMENSIONAL MHD SIMULATIONS OF SUPERNOVA REMNANTS

T. Kuzyo, O. Petruk

Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics, NAS of Ukraine, Lviv

With the growth of affordable computational power over the last decade it became possible to perform massive 3D simulations for a wide range of physical and astrophysical phenomena. On the other hand, the domain of 3D visualization in astrophysical hydrodynamics is not explored to the full extent yet and needs deeper insights into its data representation capabilities.

We are interested in the evolution of supernova remnants (SNRs) which is described by a system of magnetic hydrodynamics equations. Our approach allows to track details and features of SNR evolution across a wide range of spatial and temporal scales. The presence of multiple components (shock wave, magnetic field, stellar ejecta, interstellar gas) and complex structures in SNRs make them a great field for application of various visualization scenarios.

РОЗМІРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СКЛАДНОГАЛУЖЕНИХ ПОЛІМЕРІВ

Х. Гайдуківська, В. Блавацька

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів

В даній роботі зосереджується увага на описі універсальних розмірних характеристик складногалужених макромолекул з використанням моделі неперервного ланцюжка. Поняття складногалужених полімерів включає в себе об'єкти які мають більше ніж один центр галуження. Розмірні співвідношення, що дозволяють оцінити особливості розміру та форми складних макромолекул порівняно з лінійними ланцюжками, розраховуються для кількох структур: пом-пом полімеру, структури з кількох з'єднаних зірок, та йоршикового полімеру. В гаусовому наближенні були розраховані радіуси гірації та гідродинамічні радіуси запропонованих складногалужених макромолекул. Кількісно описано компактифікацію розміру таких структур порівняно з лінійними.

ВИЗНАЧЕННЯ ЗАПЛУТАНОСТІ СИСТЕМИ КУБІТІВ НА КВАНТОВОМУ КОМП'ЮТЕРІ ІВМQ-OURENSE

А. Кузьмак

Кафедра теоретичної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка

Прпонується алгоритм для визначення заплутаності стану одного кубіта із рештою кубітів системи, що пригтовлений на квантовому комп'ютері. За допомогою даного алгоритму знаходиться заплутаність станів кота Шредінгера і Вернера пригтовлених на квантовому комп'ютері івмq-ourense, що розроблений компанією ІВМ. Також визначається заплутаність змішаного стану, що складається із двох станів Белла $|\Phi^+\rangle$ та $|\Phi^-\rangle$.

ВІД КЛАСИЧНОГО БІТА ДО КВАНТОВОГО

Г. Лаба¹, В. Ткачук²

¹Національний університет “Львівська політехніка”, Львів

²Кафедра теоретичної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка

Починаючи з класичного біта буде введено поняття квантового біта та хвильової функції. Буде розглянуто системи класичних та квантових бітів, зроблено їх порівняння, проаналізовано їх подібність та відмінність. Також буде зроблено короткий огляд сучасних проблем квантової інформації.

SPECTROSCOPIC PROPERTIES AND POSSIBLE APPLICATION OF THE Nd-DOPED BORATE GLASSES

B. V. Padlyak^{1,2}, R. Lisiecki³, T. B. Padlyak², V. T. Adamiv²

¹University of Zielona Góra, Institute of Physics, Division of Spectroscopy of Functional Materials, Zielona Góra, Poland

²Vlokh Institute of Physical Optics, Department of Optical Materials, Lviv

³Department of Spectroscopy of Laser Materials, Institute of Low Temperatures and Structure Research of the PAS

The electron paramagnetic resonance (EPR), optical absorption, luminescence (emission and excitation) spectra as well as luminescence kinetics of the Nd^{3+} centres in a series of borate glasses with $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Nd}$, $\text{LiCaBO}_3:\text{Nd}$, and $\text{CaB}_4\text{O}_7:\text{Nd}$ compositions containing 0.5 and 1.0 mol. % Nd_2O_3 have been investigated and analysed. Using EPR and optical spectroscopy data it was shown that the Nd impurity is incorporated into the network of investigated glasses as Nd^{3+} ($4f^3$, $^4\text{I}_{9/2}$) ions, exclusively. All observed $f - f$ electronic transitions of the Nd^{3+} centres in optical absorption and luminescence spectra of the investigated glasses were identified. Local structure of the Nd^{3+} luminescence centres in the borate glasses network is proposed [1]. Theoretical and experimental oscillator strengths (f_{theor} and f_{exp}) and phenomenological intensity parameters ($\Omega_2, \Omega_4, \Omega_6$) for observed Nd^{3+} absorption transitions containing 1.0 mol. % Nd_2O_3 have been determined using standard Judd–Ofelt theory. The spectroscopic parameters of relevance to laser applications such as the radiative transitions rate (W_r), luminescence branching ratio (β), radiative lifetime (τ_{rad}), and emission cross-section (σ_{em}) for Nd^{3+} centres in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Nd}$, $\text{LiCaBO}_3:\text{Nd}$, and $\text{CaB}_4\text{O}_7:\text{Nd}$ glasses have been calculated. Luminescence decay curves of the Nd^{3+} centres from the $^4\text{F}_{3/2}$ emitting level for all investigated glasses were satisfactory described by single exponential decay. The obtained experimental lifetimes were compared with those calculated and quantum efficiency (η) of the $^4\text{F}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{11/2}$ transition for Nd^{3+} centres in the investigated glasses

were estimated. Presented results show that the $\text{LiCaBO}_3\text{:Nd}$ and $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7\text{:Nd}$ glasses can be promising materials for Nd^{3+} solid-state lasers with LED pumping. Study of the laser generation in the investigated borate glasses is in progress.

[1] B. V. Padlyak, R. Lisiecki, T. B. Padlyak, V. T. Adamiv, *J. Lumin.* **198**, 183 (2018).