

ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА
ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМЕНІ ПРОФЕСОРА ІВАНА ВАКАРЧУКА

РІЗДВЯНІ ДИСКУСІЇ 2024

ПРОГРАМА І ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Львів, 26–27 грудня 2024 року
Ауд. 10 (вул. Драгоманова, 12)

РІЗДВЯНІ ДИСКУСІЇ 2024

26 грудня 2024 року

09:30 Відкриття

Головуючий: **В. Ткачук**

09:40–10:00 *Yu. Holovatch*, Julian Hirniak, an early proponent of periodic chemical reactions

10:00–10:20 *P. Sarkanych*, Collective decision-making with heterogeneous biases: Role of network topology and susceptibility

10:20–10:40 *A. Ровенчак*, Аналіз стійкості мереж вірус–господар за допомогою мережевих характеристик і термодинаміки

10:40–11:00 *O. Hryhorchak*, Studying 1D semi-infinite periodic structures using quantum mechanical impedance

11:00–11:20 *B. Ігнатюк*, Модель Ізинга у статистиці Рені: ентропійні фазові переходи та розмірні ефекти

11:20–12:00 Кава

Головуючий: **Ю. Головач**

12:00–12:20 *A. Trokhymchuk*, Heterophase fluctuations in hard disks confined to a narrow pore

12:20–12:40 *V. Mykhaylyk*, Multimodal non-contact luminescence thermometry using oxides doped with transition metal ions

12:40–13:00 *T. Kuzyo*, The analysis of ejecta structure in Tycho's and Kepler's snrs

13:00–13:20 *N. Susulovska*, Quantifying the entanglement of quantum hypergraph states generated by RZZY gates

13:20–13:40 *B. Шевчук*, Можливість коливних квазіперіодичних процесів у кристалі з точковими дефектами

13:40–15:00 Обід

Головуючий: **А. Ровенчак**

15:00–15:20 *I. Shcherba*, Possible smart materials based on compounds with valence unstable rare earth elements

15:20–15:40 *A. Panasyuk*, Hirota dispersionless system and hidden symmetries of heavenly equation

15:40–16:00 *Ю. Яремко*, До питання про релятивістичну брахістохрону

16:00–16:20 *P. Trokhimchuk*, Main peculiarities of relaxed optics

16:20–16:40 *M. Samar*, Modelling physical systems in quantized space on a quantum computer

16:40–17:00 *Kh. Gnatenko*, Properties of weighted quantum graph states and their quantification on a quantum computer

17:00–... Виставка картин Святослава Тимика

27 грудня 2024 року

Головуючий: **О. Держко**

09:40–10:00 *M. Zarichnyj*, On geometric properties of spaces of idempotent measures

10:00–10:20 *Л. Янків-Вітковська*, Моделювання світлового забруднення атмосфери

10:20–10:40 *Yu. Kalyuzhnyi*, Viscosity and phase behavior of bi-specific antibodies in aqueous solution

10:40–11:00 *G. Monastyrskiy*, Scanning electron microscopy study of model liposomes and circulating (metastatic) tumor cells

11:00–11:20 *M. Patrii*, X-ray spectral analysis of Si-, S- and Fe-rich ejecta components

11:20–12:00 **Кава**

Головуючий: **М. Самар**

12:00–12:20 *O. Derzhko*, Do bulk properties of a solid depend on its form?

12:20–12:40 *B. Padlyak*, Local structure and spectroscopy of the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu},\text{Sm}$ glasses

12:40–13:00 *Yu. Tarasov*, The correlation between the localization and outward leakage of surface plasmon polaritons during their scattering by random inhomogeneities of metal boundaries

13:00–13:20 *Kh. Haydukivska*, Conformational transitions in stimuli responsive copolymer bottlebrushes: A molecular dynamics study

13:20–13:40 *I. Kindrat*, Spectroscopy of the lithium tetraborate glass co-doped with Mn and Eu

13:40–15:00 **Обід**

Головуючий: **Л. Янків-Вітковська**

15:00–15:20 *B. Novosyadlyj*, Томографія Темних віків і Космічного світанку в лініях гідрогену і перших молекул як тест космологічних моделей

15:20–15:40 *S. Kondej*, Resonances in two-dimensional quantum systems with perturbed waveguides

15:40–16:00 *V. Tytarenko*, Quantum mechanical modeling of the interaction of carbon-containing nanomaterial particles with nickel ions

16:00–16:20 *O. Sokolovskiy*, Динаміка малих флуктуацій в кінетиці Больцмана

16:20–16:40 *O. Петрук*, Еволюція поляризованого радіовипромінювання від залишку наднової SN1987A

16:40–17:00 *V. Tkachuk*, Quantum computation of the ground state of the Ising model

17:00–... **Колядки від Михайла Зарічного та Христини Гнатенко. Закриття**

JULIAN HIRNIAK, AN EARLY PROPONENT OF PERIODIC CHEMICAL REACTIONS

*Niklas Manz*¹, *Yurij Holovatch*^{2,3,4,5}, *John Tyson*⁶

¹College of Wooster, Department of Physics, USA

²Institute for Condensed Matter Physics NASU, Lviv

³⁴ Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems,
Leipzig–Lorraine–Lviv–Coventry

⁴Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, United Kingdom

⁵Complexity Science Hub Vienna, Vienna, Austria

⁶Virginia Polytechnic Institute and State University,
Department of Biological Sciences, Blacksburg, USA

We present and discuss the work and scientific legacy of JULIAN HIRNIAK, the Ukrainian chemist and physicist who published two articles in 1908 [1] and 1911 [2] about periodic chemical reactions. Over the last 110+ years, his theoretical work has often been cited favorably in connection with ALFRED LOTKA's theoretical model of an oscillating reaction system. Other authors have pointed out thermodynamic problems in HIRNIAK's reaction scheme. Based on English translations of his 1908 Ukrainian and 1911 German articles, we show that HIRNIAK's claim (that a cycle of inter-conversions of three chemical isomers in a closed reaction vessel can show damped periodic behavior) violates the Principle of Detailed Balance (i.e., the Second Law of Thermodynamics), and that HIRNIAK was aware of this Principle. We also discuss his results in relation to LOTKA's first model of damped oscillations in an open system of chemical reactions involving an auto-catalytic reaction operating far from equilibrium [3]. Finally, we examine historical and factual misunderstandings related to JULIAN HIRNIAK and his publications [4].

- [1] Ю. Гірняк. (J. Hirniak), *Про періодичні хемічні реакції. (About periodic chemical reactions)*, Збірник Математично-Природописно-Лікарської Секції Наукового Товариства імени Шевченка, (Proceedings of the Mathematical-Natural Sciences-Medical Section of the Shevchenko Scientific Society in Lviv) **12**, 1 (1910) .
- [2] J. Hirniak, *Zur Frage der periodischen Reaktionen (On the question of periodic reactions)*, Z. Phys. Chem. **75U** 675 (1911).
- [3] A. J. Lotka, *Zur Theorie der periodischen Reaktionen (On the theory of periodic reactions)*, Z. Phys. Chem. **72U**, 508 (1910).
- [4] N. Manz, Yu. Holovatch, J. Tyson, *Julian Hirniak, an early proponent of periodic chemical reactions*, React. Kinet. Mech. Catal. **37** 2507 (2024).

АНАЛІЗ СТІЙКОСТІ МЕРЕЖ ВІРУС–ГОСПОДАР ЗА ДОПОМОГОЮ МЕРЕЖЕВИХ ХАРАКТЕРИСТИК І ТЕРМОДИНАМІКИ

А. Ровенчак, М. Гусев

Кафедра теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука,
Львівський національний університет імені Івана Франка, Україна

Розуміння взаємодій вірус–господар має важливе значення для прогнозування стабільності мережі за різних впливів. У цьому дослідженні ми пропонуємо аналіз мереж вірусів для кількох організмів (*Homo sapiens*, *Mus musculus*, *Gallus gallus*), що містять як спрямовані, так і ненаправлені зв'язки. Ми розраховуємо низку мережевих параметрів, зокрема пов'язаних із термодинамікою, щоб отримати уявлення про структурну стійкість і динамічну поведінку мереж. Щоб оцінити стійкість, ми моделюємо два різні сценарії видалення вузлів: націлювання на найвпливовіші з них та

випадковий вибір. Наші висновки сприятимуть з'ясуванню можливостей термодинамічного підходу до вивчення мереж типу вірус–господар і глибшому розумінню їхньої динаміки.

COLLECTIVE DECISION-MAKING WITH HETEROGENEOUS BIASES: ROLE OF NETWORK TOPOLOGY AND SUSCEPTIBILITY

Yunus Sevinchan^{1,2}, *Petro Sarkanych*^{3,4}, *Abi Tenenbaum*⁵, *Yurij Holovatch*^{3,4,6,7}

¹Institute for Theoretical Biology, Humboldt Universität zu Berlin, Germany

²Research Cluster of Excellence “Science of Intelligence”, Berlin, Germany

³Institute for Condensed Matter Physics NASU, Lviv

⁴L⁴ Collaboration & Doctoral College for the Statistical Physics of Complex Systems, Leipzig–Lorraine–Lviv–Coventry

⁵Yale University, Department of Physics, New Haven, Connecticut, USA

⁶Centre for Fluid and Complex Systems, Coventry University, United Kingdom

⁷Complexity Science Hub Vienna, Vienna, Austria

The effect of prior information and biases on collective decision making has become a popular research topic in recent years. In 2016 Hartnett et.al.[1] proposed a model that takes into account heterogeneous preferences of individuals, i.e. biases. However, the effect these biases have on the decision making was only analysed in the case of lattice topology and complete graph[2, 3]. On the other hand, social structures often have a topology of a random network. In this work, we aim to investigate how network topology affects collective decision making in cases when each individual has bias.

[1] A. T. Hartnett, E. Schertzer, S. A. Levin, I. D. Couzin, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 038701 (2016).

[2] P. Sarkanych, M. Krasnytska, L. Gómez-Nava, P. Romanczuk, Yu. Holovatch, *Phys. Biol.* **20**, 045005 (2023).

[3] P. Sarkanych, Y. Sevinchan, M. Krasnytska, P. Romanczuk, Yu. Holovatch, *Condens. Matter Phys.* **27**, 33801 (2024).

[4] Y. Sevinchan, P. Sarkanych, A. Tenenbaum, Yu. Holovatch, P. Romanczuk, preprint arXiv:2411.19829 (2024).

STUDYING 1D SEMI-INFINITE PERIODIC STRUCTURES USING QUANTUM MECHANICAL IMPEDANCE

Orest Hryhorchak

Professor Ivan Vakarchuk Department for Theoretical Physics,

Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

e-mail: Orest.Hryhorchak@lnu.edu.ua

The concept of allowed and forbidden energy bands can be readily understood through the study of infinite, perfectly periodic systems, making them widely used models for simulating real crystals. However, these models neglect the influence of surfaces and internal inhomogeneities on a crystal's energy structure. Addressing this challenge requires breaking the ideal lattice periodicity, which is known to cause the emergence of energy levels within forbidden zones. When these levels arise due to the presence of a surface, they are referred to as surface levels.

In this work, we examine one of the simplest cases of periodicity violation: the presence of a single side edge, representing a class of semi-infinite systems. We reformulate the analysis of such systems within the framework of quantum wave impedance. Using this approach, we investigate the semi-infinite Dirac comb and derive the conditions for the existence of surface states.

МОДЕЛЬ ІЗИНГА У СТАТИСТИЦІ РЕНІ: ЕНТРОПІЙНІ ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ ТА РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ

В. В. Ігнатюк^{1,2}, А. П. Моїна¹

¹Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, Україна

²Кафедра теоретичної фізики імені проф. Івана Вакарчука, Львівський національний університет імені Івана Франка, Україна

Основні засади статистики Рені [1] застосовано для опису ефектів скінченного розміру у одномірній моделі Ізинга. На відміну від традиційного підходу [2-3], коли система знаходиться в наперед визначеному фіксованому оточенні скінченного розміру, ми розглядаємо в якості резервуара певну частину самої досліджуваної системи. Внутрішня енергія та температура системи рохрахована з використанням розподілу Рені та вважаються рівними аналогічним величинам, обчисленим у мікrokанонічному ансамблі. Це дозволяє самоузгоджено розрахувати індекс Рені q та параметр Лагранжа T , пов'язати їх з фізично спостережуваною температурою T_{ph} і показати, що у широкому діапазоні температур у системі можливі ентропійні фазові переходи [4]. Зокрема показано, що обидва параметри (q та T) мають стрибок при збільшенні розміру підсистеми L , після чого ентропія Рені S_R стає неадитивною функцією L . Водночас, очікувано відсутній температурний фазовий перехід.

Перевірено числовим чином, що наш підхід задовольняє співвідношення $q \approx 1 + k_B/C_{VE}$ у всій області L зліва від точки фазового переходу, де C_{VE} означає теплоємність резервуару. Справа від точки переходу у вузькій області L реалізується інше відоме співвідношення $q \approx 1 - k_B/C_{VE}$ [1]. Крім того, в точці переходу справджується відома з флуктуаційної термодинаміки границя $\lim_{\eta \rightarrow 0} \partial S_R / \partial \eta = 1/2C_V$, де $\eta = 1 - q$ відіграє роль “параметра порядку”, а C_V означає теплоємність підсистеми.

Також досліджено температурну залежність внутрішньої енергії $U(T_{\text{ph}})$ при фіксованому q та вплив ефектів скінченного розміру на термодинаміку системи. Слід зауважити, що на відміну від традиційної термостатистики Рені [3], ми можемо описувати поведінку системи в усій області значень параметра q : від $q \rightarrow 1$, що відповідає канонічному розподілу Гіббса, до $q \rightarrow 0$, що відповідає мікrokанонічному розподілу. Іншими словами, самоузгодженим чином можна досліджувати узагальнену термодинаміку об'єктів “скінченна підсистема як частина тієї ж самої повної системи скінченного розміру”.

- [1] A. G. Bashkirov, in: *Chaos, Nonlinearity, Complexity: The Dynamical Paradigm of Nature* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2006), p. 114.
- [2] E. Ruthotto. Physical temperature and the meaning of the q parameter in Tsallis statistics, preprint arXiv: cond-mat/0310413v1 (2003).
- [3] A. S. Parvan, T. S. Biró, Phys. Lett. **374**, 1951 (2010).
- [4] V. V. Ignatyuk, A. P. Moina, Condens. Matter Phys. **27**, 43603 (2024).

HETEROPHASE FLUCTUATIONS IN HARD DISKS CONFINED TO A NARROW PORE

Andriy Trokhymchuk^{1,2}

¹Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Slovenia

²Institute for Condensed Matter Physics, NASU, Lviv, Ukraine

By a combination of computer simulations [1] and a unit cell model approach [2], we study the apparent bimodality of local structural ordering in a two-dimensional (2D) array of hard disks being confined laterally within a quasi-1D hard wall channel of the width commensurate with the bulk

2D triangular lattice at disk close packing [3]. It is shown that such a system possesses heterophase fluctuations that have not yet been observed for the 2D bulk or confined hard disks. The heterophase fluctuations occur in the range of packing densities associated with the freezing-melting transition in bulk 2D hard disks. In the literature this phenomenon is physically unexpected for confined quasi-1D hard disks [4,5].

- [1] A. Huerta, T. Bryk, V.M. Pergamenshchik, A. Trokhymchuk, Phys. Rev. Res. **2**, 033351 (2020) .
- [2] A. Huerta, D. Henderson, A. Trokhymchuk, Phys. Rev. E **74**, 061106 (2006).
- [3] A. Huerta, T. Bryk, V.M. Pergamenshchik, A. Trokhymchuk, Front. Phys. **9**, 636052 (2021).
- [4] Y. Hu, P. Charbonneau, Phys. Rev. Res. **3**, 038001 (2021).
- [5] A. Trokhymchuk, V. M. Pergamenshchik, A. Huerta, T. Bryk, Phys. Rev. Res. **3**, 038002 (2021).

MULTIMODAL NON-CONTACT LUMINESCENCE THERMOMETRY USING OXIDES DOPED WITH TRANSITION METAL IONS

V. B. Mykhaylyk

Diamond Light Source, Harwell Campus, UK

Luminescence thermometry is a non-contact technique that utilises the temperature-dependent variation of emission characteristics in selected luminescence materials for temperature monitoring. This approach is particularly valuable in harsh environments where physical contact is impractical due to isolation requirements, shielding, or the non-stationary nature of the object. Expanding the applicability of luminescence thermometry to cryogenic temperatures necessitates the discovery of materials with luminescence properties optimized for such extreme conditions. Materials doped with transition metal (TM) ions are especially promising for thermometric applications due to their luminescence properties' high sensitivity to temperature changes. In this presentation, I will share the results of systematic studies examining the temperature-dependent luminescence behaviour of oxides doped with Cr^{3+} and Mn^{4+} ions, across the 4.5–300 K temperature range. The responsivity of the luminescence characteristics that can be used for the non-contact measurements of temperature i.e. luminescence intensity ratio, wavelength shift and decay time constant is evaluated. Additionally, the primary features influencing the performance of luminescence thermometry at cryogenic temperatures are identified and discussed.

THE ANALYSIS OF EJECTA STRUCTURE IN TYCHO'S AND KEPLER'S SNRS

T. Kuzyo, O. Petruk, M. Patrii

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

High-resolution observational data of Galactic supernova remnants (SNRs) offer detailed insights into the morphology of such objects. In particular, thermal X-ray maps of SNRs serve as important resources for investigating the structure and spatial distribution of supernova ejecta, which hold the imprints of explosion dynamics and subsequent SNR evolution.

From observations we can see significant differences between individual SNR morphologies, so analyzing the maps from observational data we can obtain some quantitative characteristics that would describe such differences. This information would allow us to make conclusions about conditions in the supernova during the explosion and formation of inhomogeneity in its ejecta.

By bridging the gap between observations and theoretical models, we hope to improve our understanding of physical processes in supernova remnants and their impact on the interstellar medium.

QUANTIFYING THE ENTANGLEMENT OF QUANTUM HYPERGRAPH STATES GENERATED BY RZZY GATES

N. A. Susulovska, Kh. P. Gnatenko

Professor Ivan Vakarchuk Department for Theoretical Physics,
Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

Quantum hypergraph states have garnered a lot of interest in recent years due to their wide applicability as a computational resource in various quantum schemes and algorithms (for instance, see [1]). These states can be uniquely described by mathematical hypergraph structures with hypergraph vertices representing qubits and hyperedges indicating interactions in multi-qubit clusters, thus generalizing the well-established notion of graph states, where only bipartite interactions are permitted. Studying physical properties of hypergraph states such as entanglement presents an important research task both fundamentally and in the light of practical quantum computing.

We consider 3-uniform hypergraph states generated by the action of parameterized gates $RZZY_{ijk}(\theta_{ijk}) = \exp(-i\theta_{ijk}\sigma_i^z\sigma_j^z\sigma_k^y/2)$ acting on subsets of qubits $\{i, j, k\}$ of the multi-qubit system initialized in state $|+\dots+\rangle$. Given the structure of utilized three-qubit operators, such states are mapped to weighted directed hypergraphs. To quantify the entanglement of hypergraph states we leverage the geometric measure of entanglement and its explicit relation to mean spin [2]. Quantum states corresponding to hypergraphs of specific structures including chains, stars, regular lattices and binary trees are investigated in detail. We obtain an expression for the geometric measure of entanglement of an arbitrary qubit with other qubits in such states represented by arbitrarily weighted hypergraphs and establish its dependency on state parameters. In the case when all the hyperedges are assigned equal weights, we show that the geometric measure of entanglement of a qubit is determined by the degree of its corresponding hypergraph vertex. Additionally, we prepare special cases of hypergraph states of investigated structures on IBM's quantum simulator Qiskit Aer [3] and estimate their entanglement based on mean spin measurements. The obtained result of quantum computations and theoretical calculations are in a close agreement.

[1] M. Rossi, M. Huber, D. Bruß, C. Macchiavello, *New J. Phys.* **15**, 113022 (2013).

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

[3] Qiskit Aer Documentation; https://qiskit.github.io/qiskit-aer/getting_started.html.

МОЖЛИВІСТЬ КОЛИВНИХ КВАЗІПЕРІОДИЧНИХ ПРОЦЕСІВ У КРИСТАЛІ З ТОЧКОВИМИ ДЕФЕКТАМИ

В. Н. Шевчук

Факультет електроніки та комп'ютерних технологій,
Львівський національний університет імені Івана Франка, Україна
e-mail: shevchukvololymyr236@gmail.com

У межах припущень власнодефектного розупорядкування кристалічної ґратки, взаємодії точкових дефектів та квазіхімічних перетворень електрично активних елементарних дефектів у процесах їх асоціації та зворотнього — дисоціації розглядається можливість протікання коливних змін концентрацій n_i вказаних i -го сорту дефектів кристалів з часом t . При цьому кристал загалом перебуває близько біля точки термодинамічної рівноваги з певним незначним відхиленням. Температура кристалу служить чинником відхилення концентрацій n_i від рівноважних їхніх значень, зокрема, в силу залежності енергії зв'язку складників асоціата від температури. Априорі вважаємо, що в моделі процесів першого порядку швидкість зміни величини n_i у найпростішому вигляді здійснюється за диференціальним законом:

$$dn_i/dt = \pm k_i n_i. \quad (1)$$

У першому наближенні k_i — коефіцієнт пропорційності, знак якого вказує напрям квазіхімічного перетворення (збільшення або зменшення відповідних концентрацій), а система рівнянь (1) уможливорює визначення величин концентрацій. Ті у свою чергу впливатимуть на фізичні властивості кристала, зокрема на значення загальної електропровідності середовища, у якому реалізуються процеси перетворень з коливним характером зміни співвідношення концентрацій у системі електрично активних (заряджених) та з нульовим зарядом точкових дефектів. Використовуючи символіку Крегера-Вінка, розглядаються різні типи зміни зарядового стану дефектів на прикладі кристалів структурного типу шееліту та інших складних оксидів.

Експериментально вивчаються кінетичні характеристики при фіксованих температурах зростаючи як прояв самоорганізації у системі дефектів і переходу її у квазірівноважний стан. Деякі квазіперіодичні явища у кристалах розглядалися попередньо нами [1] та іншими авторами (див., напр., [2]). Приймається задовільний опис спостережуваних періодичних процесів в рамках математичної моделі, вперше запропонованої Ю. Гірняком [3] при аналізі кінетики протікання т. зв. кільцевих хімічних реакцій першого порядку в однорідному середовищі без каталізатора та обґрунтуванні ним періодичного закону зміни концентрацій у випадку трьох реагентів. Детально ознайомитися з історією цього питання можна у публікації [4] з вивчення постаті Ю. Гірняка.

[1] V. Shevchuk, *J. Phys. Stud.* **24**, 1998 (2020).

[2] M. R. Rijnders, in *Periodic layer formation during solid state reactions. TU/E* [Phd Thesis 1, Chemical Engineering and Chemistry] (Technische Universiteit Eindhoven, 1996), Ch. 3.

[3] Ю. Гірняк, *Записки Математично-Природописно-Лікарської Секції НТШ (Львів)* **12**, 1 (1908).

[4] В. Шевчук, *Праці НТШ. Фіз. збірн.* **10**, 261 (2020).

POSSIBLE SMART MATERIALS BASED ON COMPOUNDS WITH VALENCE UNSTABLE RARE EARTH ELEMENTS

Ivan Shcherba¹, Henrik Noga², Lev Bekenov³

¹Faculty of Physics, Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

²Institute of Technical Sciences, University of the NEC, Krakow, Poland

³G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, NASU, Kyiv, Ukraine

Despite the impressive number of publications on smart materials, no attempt has yet been made to classify compounds with a valence unstable rare earth element (R.E.) as smart materials. Our studies demonstrate that in some compounds the value of the valence of the R.E. can be changed by external and internal factors. The examples include the external pressure- or temperature-induced change in the valence value (YbInAu₂, EuCu₂Si₂), the dependence of the valence on the structural type of a compound (YbNi₄In and YbNiIn₄), the dependence of the valence on the second component of ternary intermetallic compounds [YbTCu₄ ($T = \text{Au}$ and Mg) and Yb₂T₃Sn₅ ($T = \text{Pt}$ and Pd)], the effect of d- and f-level occupancy on the valence state of Ce and Yb in compounds with the ThMn₁₂ structure (Ce and Yb in RM₄Al₈), the dependence of the valence on the occupation of d-levels. Changing the value of the R.E. may significantly alter the electrical and magnetic properties of compounds. Based on our studies and the review of a considerable number of research papers on the physics of compounds with intermediate valence, we argue that such compounds may be attributed to such a wide class of materials that are commonly referred to as smart materials. The most difficult part of creating smart materials and systems based on them is to provide feedback between the external impact and the object's response. Materials become smart when the sensing and actuating elements built on their basis are combined into a smart structure to achieve the required advanced functionality.

HIROTA DISPERSIONLESS SYSTEM AND HIDDEN SYMMETRIES OF HEAVENLY EQUATION

Andriy Panasyuk

Cardinal Stefan Wyszyński University, Warsaw, Poland

Joint work with Adam Szereszewski.

In 2021 Konopelchenko, Schief and Szereszewski observed that solutions of 4D dispersionless Hirota system also solve the general heavenly equation describing self-dual vacuum Einstein metrics in neutral signature. They also noticed that the symmetry $f \rightarrow \phi(f)$ of the Hirota system essentially changes the properties of the corresponding metric.

In this talk we shall restate these observations in the context of II Plebański heavenly equation (IIPHE). Namely, we first extend the hierarchy for this equation found by Dunajski and Mason in 2000 to odd dimensions. We then consider the corresponding 5D system from this hierarchy with a special type of symmetry generalizing the triholomorphic symmetry of IIPHE. The reduction with respect to this symmetry (which in a sense imitate the reduction of self-dual vacuum Einstein metrics with respect to a tri-holomorphic symmetry ending in special Einstein–Weyl structures) gives an analogue of the dispersionless Hirota system for IIPHE. Such a point of view allows to reinterpret the symmetry $f \rightarrow \phi(f)$ mentioned and obtain explicit formulas for the metric depending on ϕ and for its Weyl spinor. We present some examples showing that this last changes essentially along with ϕ .

ДО ПИТАННЯ ПРО РЕЛЯТИВІСТИЧНУ БРАХІСТОХРОНУ

Юрій Яремко

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, Україна

Буде розглянуто ряд моделей в просторах з різними групами ізометрій (евклідовому, псевдоевклідовому, де Сіттера), які розв'язуються в термінах знаменитої кривої, вперше отриманої Йоганном Бернуллі в 1696 р.

MAIN PECULIARITIES OF RELAXED OPTICS

Petro P. Trokhimchuck

Lesya Ukrainka Volyn National University, Lutsk, Ukraine
e-mails: Trokhimchuck.Petro@vnu.edu.ua, trope1650@gmail.com

Relaxed Optics (RO) is a branch of physics that was created to describe the processes of interaction of laser radiation from the point of view of relaxation of the primary optical excitations of the medium [1–6]. The need for its creation is due to the development of laser technologies. Roughly speaking, RO is a synthesis of solid state radiation physics, physical chemistry, physics of critical phenomena, physical optics, including Nonlinear Optics, and quantum electronics into a single system [1–3].

The main concepts of RO are kinetic-dynamic, electromagnetic and coherent have a complex (cascade) structure [3]. Because of this, the main theories and models of Relaxed Optics have a cascade (chain) structure. Moreover, the elements of the cascade themselves can belong to different branches of physics, which are included in RO. The photoeffect model adapted in this way includes photoionization processes and thermodynamic relaxation [1].

To explain the microscopic nature of the formation of stable donor centers in antimonite and indium arsenide [1], a cascade model of the step-by-step excitation of the corresponding chemical bonds in the excitation saturation regime was constructed. The calculations were based on the two-dimensional lattice of sphalerite [1, 3]. A phenomenological chain of relaxation times was also constructed [1–3].

A cascade model of excitation of the corresponding number of coordination numbers was used for silicon and germanium [1–3]. The basis was the phase diagrams of silicon and germanium. This made it possible to explain the reason for the emergence of hedgehog-like laser-induced structures for these and other materials.

Cascade processes of a slightly different type lead to the optical breakdown of a substance when it is irradiated with focused pulsed laser radiation [5, 6]. In this case, next chain process takes place: diffraction stratification of focused radiation; generation of optically-induced Cherenkov radiation, whose generating cones are perpendicular to the generating cones of focusing; generation of Cherenkov radiation in each cone; interference of Cherenkov radiation; the interference maxima of the short-wavelength part of Cherenkov radiation correspond to the observed cascade pattern of optical breakdown [5, 6]. Corresponding models are represented too.

- [1] P. P. Trokhimchuck, *Foundations of Relaxed Optics. 2-nd ed.* (Lesya Ukrainka Volyn University Press “Vezha”, Lutsk, 2011).
- [2] P. P. Trokhimchuck, *Nonlinear and Relaxed Optical Processes. Problems of interactions* (Vezha-Print, Lutsk, 2013).
- [3] P. P. Trokhimchuck, *Relaxed Optics: Realities and Perspectives* (Lambert Academic Press, Saarbrücken, 2020).
- [4] P. P. Trokhimchuck, *Relaxed Optics: Modelling and Discussions 2* (AkiNik Publications, New Delhi, 2022).
- [5] P. P. Trokhimchuck, *Relaxed Optics: Modelling and Discussions 3* (AkiNik Publications, New Delhi, 2024).

MODELLING PHYSICAL SYSTEMS IN QUANTIZED SPACE ON A QUANTUM COMPUTER

M. I. Samar

Professor Ivan Vakarchuk Department for Theoretical Physics,
Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

We apply a method for detecting energy levels in a spin system to the harmonic oscillator in a deformed space with minimal length and minimal momentum, utilizing a truncated matrix approach. A quantum algorithm is presented that successfully identifies the first few energy levels of the harmonic oscillator in quantized space, yielding results that closely match analytical predictions. Additionally, we demonstrate the potential for studying anharmonic oscillators using the same spin model and algorithm.

PROPERTIES OF WEIGHTED QUANTUM GRAPH STATES AND THEIR QUANTIFICATION ON A QUANTUM COMPUTER

Kh. P. Gnatenko

Professor Ivan Vakarchuk Department for Theoretical Physics,
Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

We examine quantum graph states that can be associated with directed and weighted graphs. For quantum states corresponding to graphs of arbitrary structure, we compute the geometric measure of entanglement [1] as well as geometric properties such as curvature and torsion [2]. The calculations were performed both analytically and using quantum computing (specifically, IBM’s quantum computer Sherbrooke and the AerSimulator). We found relationships between the properties of quantum states and the characteristics of the corresponding graphs, namely the weights of the incoming and outgoing arcs, the outdegree and indegree of vertices, and the sum of the products of edge weights forming triangles and squares within the graph [1,2].

- [1] Kh. P. Gnatenko, Phys. Lett. A **521**, 129815 (2024).
- [2] Kh. P. Gnatenko, preprint arXiv:2408.01511 (2024).

ON GEOMETRIC PROPERTIES OF SPACES OF IDEMPOTENT MEASURES

Iurii Marko, Mykhailo Zarichnyi

Department of Mechanics and Mathematics, Iavn Franko Lviv National University, Ukraine
e-mails: marko13ua@gmail.com, zarichnyi@yahoo.com

The idempotent mathematics is a part of mathematics in which the field operations are replaced by an idempotent semi-ring operations, e.g., \max and $+$. If we define $x +_r y = (x^r + y^r)^{1/r}$, for positive x, y , and $r \geq 1$, then $\max\{x, y\} = \lim_{r \rightarrow \infty} (x +_r y)$, i.e., the idempotent mathematics can be regarded as an asymptotic version of the ordinary mathematics. Another speculation is that the idempotent mathematics is a result of dequantization of the ordinary mathematics.

Applications of the idempotent mathematics include mathematical physics, economic theory, optimization etc.

To the notion of probability measure in ordinary mathematics there corresponds the notion of idempotent measure in the idempotent mathematics. Informally, instead of additivity of probability measures one has the property $\mu(A \cup B) = \max\{\mu(A), \mu(B)\}$, for any idempotent measure μ .

Identifying any idempotent measure with the subgraph of its density functions, one obtains the definition of the space of idempotent measures on a topological space X as a subspace of the hyperspace $X \times [0, 1]$ satisfying certain natural properties. This allows us to consider various topologizations of the spaces of idempotent measures which are induced by the hyperspace topologies.

For compact metrizable X , the topology of the space of idempotent measures on X (denoted by $I(X)$) is completely described [1]. If X is infinite, then $I(X)$ is homeomorphic to the Hilbert cube $Q = \{(x_i)_{i=1}^{\infty} \in \ell^2 \mid |x_i| \leq 1/i\}$. As for noncompact case, the property of being an absolute retract (AR) for the class of metric spaces is established [2]. In [3] this result is applied to characterization of metric spaces X such that $I(X)$ is homeomorphic to the space σ of eventually zero sequences in ℓ^2 .

The aim of the present talk is to find spaces of idempotent measures which are homeomorphic to the space

$$\Sigma = \left\{ (x_i)_{i=1}^{\infty} \in \ell^2 \mid \sum_{i=1}^{\infty} (ix_i)^2 < \infty \right\}$$

(note that this space can be realized as the pseudoboundary of the Hilbert cube Q) as well as another model spaces of infinite-dimensional topology.

[1] L. Bazylevych, D. Repovš, M. Zarichnyi, *Topology Appl.* **157**, 136 (2010).

[2] Iu. Marko, *Visnyk Lviv. Univ. Ser. Mech.-Mat.* **92**, 86 (2021); <https://doi.org/10.30970/vmm.2021.92.086-092>.

[3] Iu. Marko, M. Zarichnyi, *Visnyk Lviv Univ. Series Mech. Math.* **94**, 72 (2022).

МОДЕЛЮВАННЯ СВІТЛОВОГО ЗАБРУДНЕННЯ АТМОСФЕРИ

Любов Янків-Вітковська

Національний університет “Львівська політехніка”, Україна
e-mail: luba_y@ukr.net

Світлове забруднення — освітлення нічного неба штучними джерелами світла, світло яких розсіюється в нижніх шарах атмосфери. Основними джерелами світлового забруднення є великі міста та потужні промислові комплекси. Серед наземних обсерваторій найсприятливіше для спостережень небо в обсерваторії Мауна-Кеа на Гавайських островах. Ця обсерваторія розташована на висоті 4700 м, де яскравість неба становить 5.8×10^{-5} кд/м². У більшості працюючих обсерваторій яскравість неба становить 10^{-4} кд/м² і такі умови для спостереження вважаються дуже добрі.

Штучне освітлення не повинно збільшувати яскравість фону, яка вимірюється на висоті 450 м, більш ніж на 10%. Один із наслідків надмірного використання штучного освітлення світло — це втрата енергії. “Міжнародна асоціація темного неба” стверджує, що для нічного освітлення щороку у світі витрачається понад 1.5 мільярда доларів США, утворюється понад 12 мільйонів тонн вуглекислого газу (CO₂), що призводить до парникових газів.

Світлове забруднення — це не лише астрономічна чи екологічна проблема, а й гостра проблема енергоефективності. Економічні витрати на освітлення північної півкулі космосу становлять мільярди євро щорічно. Згідно з дослідженнями відомої фірми Philips, лише заміна застарілих конструкцій світлодіодів і джерел світла може скоротити викиди CO₂ на 3.5 мільйони тонн на рік. У даній роботі проаналізовано основні параметри, що характеризують прозорість атмосфери; наведено законодавчі обмеження щодо світлового забруднення та запропоновано сучасні наукові підходи до розв’язання проблеми світлового забруднення атмосфери. Зроблено спробу моделювання світлового забруднення з урахуванням усіх факторів: метеорологічних умов, структури джерел світла міст, аналіз застосування існуючих одиниць вимірювання яскравості. Запропоновано інформаційний підхід до розробки параметрів математичної моделі розрахунку ефективності систем астрономічних спостережень при світловому забрудненні атмосфери, оцінювання ефективності систем астрономічних спостережень та представлено математичний апарат для її визначення.

VISCOSITY AND PHASE BEHAVIOR OF BI-SPECIFIC ANTIBODIES IN AQUEOUS SOLUTION

Y. Kalyuzhnyi¹, T. Hvozď², V. Vlachy¹

¹Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Slovenia,

²Institute for Condensed Matter Physics, NASU, Lviv, Ukraine

This study presents theoretical results for physico-chemical properties of system of molecules modeling bi-specific antibodies, such as, dual-variable-domain monoclonal antibodies (DVD-Ig) and Fabs-In-Tandem Immunoglobulin (FIT-Ig). These molecules are representatives of the engineered proteins that combine the function and specificity of two monoclonal antibodies. Individual molecules are here depicted as an assembly of nine (or in case of the Fit-Ig eleven) hard spheres, organized to resemble the Y-shaped object. The effects of the increased size, asymmetry, and flexibility of individual molecules on measurable properties of such systems of molecules are investigated. We examined the liquid-liquid phase separation, the second virial coefficient B₂, and viscosity under various experimental conditions. The calculations are compared with the data for regular monoclonal antibodies and discussed in view of the experimental results for DVD-Ig solutions available in literature.

SCANNING ELECTRON MICROSCOPY STUDY OF MODEL LIPOSOMES AND CIRCULATING (METASTATIC) TUMOR CELLS

G. Monastyrskiy¹, O. Gnatyuk¹, M. Olenchuk¹, D. Kolesnik², G.Solyanik², G. Dobbeshko¹

¹Institute of Physics NASU, Kyiv, Ukraine

²R. E. Kavetsky Institute of Experimental Pathology, Oncology and Radiobiology, NASU, Kyiv, Ukraine

Model liposomes, serving as model systems for biological membranes, play an important role in understanding a cell membrane morphology and interaction with environment including fusion and permeability. In turn, knowledge about metastatic cells from which more than 90% of cancer patients die, is very important too. Here, a scanning electron microscopy (SEM) was used to develop a new method for preparation and further study of structural characteristics of liposomes and their interaction mechanisms, as well to obtain new data about model circulating tumor cells (CTC) of different nature- adhesive and

de-adhesive. To the best of our knowledge, no microscopic images of these cells were published in literature so far. SEM images were obtained with a TESCAN MIRA LMU electron microscope in two modes: secondary electrons and back-scattering electrons. Sample preparation included fixation on the conductive silicon wafer, dry air and vacuum drying, and magnetron sputtering of 20 nm conducting gold layer. SEM images of liposomes prepared with nanoparticles of different nature such as MoS₂, WS₂, diamond and carbon nanotubes, revealed the nanoparticles inserted into the liposomes and covering the liposome surface. Average size of liposomes with nanoparticles increases by about 7–15%, and their surface changes, too. SEM images of CTC cells showing morphology of adhesive and de-adhesive cells with different contacts and peculiarities, can be used as a basis of biological knowledge on CTC. Model liposomes is one of the steps to understanding the cells communication. These data can be efficiently used in the treatment of metastatic cancers.

Acknowledgement Authors acknowledge NRFU project No 2021.01/0229 “Biophysical characteristics of circulating metastatic cells as potential targets of antimetastatic therapy”.

X-RAY SPECTRAL ANALYSIS OF Si-, S- AND Fe-REACH EJECTA COMPONENTS IN THE REMNANT OF KEPLER SUPERNOVA

M. Patrii¹, O. Petruk²

¹Faculty of Physics, Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

²Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics, NAS of Ukraine, Lviv, Ukraine

Supernova remnants (SNRs) are valuable astrophysical laboratories, providing unique insights into the final stages of stellar evolution, the mechanisms of their explosions, and the interactions between their shocks and surrounding medium. The remnant of Kepler’s supernova, which exploded in the fall of 1604, is one of the most interesting and well-studied young SNRs in our Galaxy. We present results from the spatially resolved spectral analysis of Chandra’s X-ray Observatory data. The maps of key spectral characteristics, in particular the Doppler shift maps allow us to derive the distribution of line-of-sight plasma velocities for the most prominent X-ray emission lines of Si-He α (1.6–2.1 keV), S-He α (2.3–2.6 keV) and Fe K-shell (6.0–7.0 keV) in the X-ray spectrum of Kepler SNR. The Doppler velocities, determined in the SNR’s reference frame, give us important clues about the progenitor’s initial internal structure and the anisotropic nature of the ejecta expansion.

DO BULK PROPERTIES OF A SOLID DEPEND ON ITS FORM?

Oleg Derzhko

Institute for Condensed Matter Physics, NASU, Lviv, Ukraine

Usually, the bulk properties of a macroscopically large many-particle system with short-range interparticle interactions do not depend on its shape. In the present talk, I discuss a specific frustrated quantum spin-lattice system which being placed into a magnetic field at low temperatures should provide a counterexample to that general statement. In the example under consideration, the degeneracy of the states which dominate thermodynamics, rather than their energy, appears to be shape-dependent.

More specifically, consider $N=2\mathcal{N}$ spins $S=1/2$ on a kagome-bilayer lattice which interact through antiferromagnetic Heisenberg interactions in the presence of external magnetic field h . The nearest-neighbor interlayer interaction J_2 should exceed a critical value $J_{2c}=J_1+J_x$, $J_1=J_x=J$, where J_1 is the nearest-neighbor intralayer interaction and J_x is the next-nearest-neighbor interlayer interaction. Under such conditions, the ground states in the subspaces with $S^z=N/2, \dots, N/3$ are the singlet-product states with singlets located on the J_2 bonds and obeying a hard-rhombi rule: No neighboring J_2 bonds can

be occupied. As a result, the low-temperature thermodynamics around the saturation $h_{\text{sat}}=J_2+4J$ is governed by the states which can be visualized as hard-core rhombi on a kagome lattice or, equivalently, as dimers on a hexagonal lattice. Here the crunch comes: 40 years ago Veit Elser solved exactly the dimer problem for a hexagonal lattice with general boundary and showed that the entropy of the full covering s_0 depends on the shape of the boundary [1]. In other words, the residual ground-state entropy $s_0=s(T=0)$ just below the saturation h_{sat} depends on a specific hexagonal shape. But $s(T=0)=s_0$ enters the sum rule for the specific heat:

$$\int_0^{\infty} dT \frac{c(T)}{T} = \ln 2 - s_0.$$

And therefore the (bulk) specific heat per site $c(T)$ depends on the shape of the boundary, too. Besides, in contrast to Ref. [2], the frustrated kagome-lattice quantum Heisenberg bilayer does not exhibit an order-disorder phase transition. More details about this study will appear soon [3].

My talk is based on ongoing research of a team, which includes Dmytro Yaremchuk, Taras Hutak, Vasyl Baliha, Taras Krokhmalskii, Oleg Derzhko (Lviv), Jürgen Schnack (Bielefeld), and Johannes Richter (Magdeburg). T. H., T. K., and O. D. are supported by the EURIZON project (Project No. 3025 “Frustrated quantum spin models to explain the properties of magnets over wide temperature range”), which is funded by the European Union under Grant No. 871072.

- [1] V. Elser, *J. Phys. A* **17**, 1509 (1984).
- [2] J. Richter *et al.*, *Phys. Rev. B* **97**, 024405 (2018).
- [3] D. Yaremchuk *et al.*, in preparation.

LOCAL STRUCTURE AND SPECTROSCOPY OF THE $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu,Sm}$ GLASSES

B. V. Padlyak¹, I. I. Kindrat², Y. O. Kulyk³

¹Vlokh Institute of Physical Optics, Lviv, Ukraine,

²Institute of Physics, University of Zielona Góra, Poland,

³Faculty of Physics, Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

The Cu-Sm co-doped $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ glass ($\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu,Sm}$) has been obtained by high-temperature melting technique and studied in details by X-ray diffraction (XRD), electron paramagnetic resonance (EPR), UV–Vis–NIR absorption and photoluminescence (PL) [1]. The obtained results are compared with corresponding data obtained by us for $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu}$ [2] and $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Sm}$ [3] glasses. The local structure parameters (average interatomic distances and coordination numbers) are derived from XRD data analysis. It was shown that the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu,Sm}$ glass network consists of the BO_3 (triangles) and BO_4 (tetrahedra) glass-forming units, and LiO_n ($n = 4 - 6$) polyhedra as modifiers. The EPR, optical absorption, photoluminescence emission and excitation show that Cu and Sm dopants are incorporated into the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu,Sm}$ glass network as Cu^+ ($3d^{10}$), Cu^{2+} ($3d^9$), and Sm^{3+} ($4f^5$) ions. The Cu^{2+} ions (electron spin $S = 1/2$) in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu,Sm}$ glass show an EPR spectrum of axial symmetry with characteristic 4-component hyperfine structure, caused by nuclei of ^{63}Cu (natural abundance – 69.1%, nuclear spin, $I = 3/2$) and ^{65}Cu (30.83%, $I = 3/2$) isotopes. Precise spin Hamiltonian parameters (g_{\parallel} , g_{\perp} , A_{\parallel} , A_{\perp}) and peak-to-peak first derivative linewidths of the hyperfine components ($\Delta H_{\text{pp}}^{\parallel}$ and $\Delta H_{\text{pp}}^{\perp}$) for Cu^{2+} ions at $T = 295$ K in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu,Sm}$ glass were obtained by best fitting of the simulated EPR spectrum to the experimental spectrum [1]. The Cu^{2+} cations and O^{2-} anions compose the elongated octahedrons in the network of $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu,Sm}$ glass. The optical absorption spectrum shows a very broad intense band ascribed to the ${}^2B_{1g} \rightarrow {}^2A_{1g}$, ${}^2B_{2g}$, 2E_g transitions of Cu^{2+} ions and a lot of weaker narrow bands assigned to the ${}^6H_{5/2} \rightarrow {}^6P_{7/2}$, ${}^6P_{3/2}$, ${}^4I_{9/2-15/2}$, ${}^6F_{9/2}$, ${}^6F_{7/2}$, ${}^6F_{5/2}$

transitions of Sm^{3+} ions. The PL emission and PL excitation spectra as well as PL decay kinetics of the Sm^{3+} and Cu^+ ions in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu},\text{Sm}$ glass were registered, analyzed, and discussed. In particular, the PL emission spectra exhibit a very broad band in the blue spectral range ascribed to the $3d^94s^1 \rightarrow 3d^{10}$ transition of Cu^+ ions and four narrow bands in the yellow-red spectral range assigned to the $^4G_{5/2} \rightarrow ^6H_J$ ($J = 5/2 - 11/2$) transitions of Sm^{3+} ions. The PL decay kinetics of Sm^{3+} and Cu^+ ions in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu},\text{Sm}$ glass are non-single exponential and characterized by a mean lifetime in the millisecond and microsecond time ranges, respectively. Quenching of the Sm^{3+} PL intensity, shortening of the Sm^{3+} decay time and prolongation of the Cu^+ decay time were observed in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu},\text{Sm}$ glass in comparison with the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu}$ [2] and $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Sm}$ [3] glasses. The excitation energy transfer and re-absorption processes from Sm^{3+} ions to Cu^+ and Cu^{2+} ions have been discussed. A wide range of emission colors from blue to yellow can be achieved in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Cu},\text{Sm}$ glass by varying of the luminescence excitation wavelength that is important for practical application.

- [1] B. V. Padlyak, I. I. Kindrat, V. T. Adamiv, A. Drzewiecki, B. Cieniek, I. Stefaniuk, Phys. Chem. Chem. Phys. **26**, 22006 (2024); <https://doi.org/10.1039/d4cp01633e>.
- [2] B. Padlyak, W. Ryba-Romanowski, R. Lisiecki, O. Smyrnov, A. Drzewiecki, Y. Burak, V. Adamiv, I. Teslyuk, J. Non-Cryst. Solids **356**, 2033 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2010.05.027>.
- [3] I. I. Kindrat, B. V. Padlyak, B. Kukliński, A. Drzewiecki, V. T. Adamiv, J. Lumin. **213**, 290 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2019.05.045>.

THE CORRELATION BETWEEN THE LOCALIZATION AND OUTWARD LEAKAGE OF SURFACE PLASMON POLARITONS DURING THEIR SCATTERING BY RANDOM INHOMOGENEITIES OF METAL BOUNDARIES

Yu. V. Tarasov, O. M. Stadnyk

O. Ya. Usikov Institute for Radiophysics and Electronics NASU, Kharkiv

We examine the problem of scattering of TM-polarized surface plasmon polariton wave (SPP) by the finite segment of metal–vacuum interface with either a random impedance or with a random corrugation of the metal surface. We analyze in detail the solution to the integral equation connecting the scattered field and the incident SPP, which is valid for any strength of the scattering and dissipative properties of the conducting half-space. For random surface impedance, we show that the norm of the intermode scattering operator is not only determined by the parameters of the random impedance (the variance, correlation radius, the length of the heterogeneous section of the interface), but depends crucially on the metal conductivity [1].

For a small norm of the integral operator, the incident SPP mostly radiates into vacuum, and the intensity of this leaking field is expressed in terms of the pair correlation function of the impedance. Under strong scattering regime, the radiation into the upper half-space is highly suppressed and the SPP is mainly backscattered from the heterogeneous surface segment. Such a mirroring should also take place at small norm of the scattering operator, yet in this case it is related to Anderson’s localization of the SPP within the disordered segment, the effect which results from the multiple backscattering of the SPP [2].

Similar behaviour of the plasmon polariton propagating along the metal interface is discovered provided the imperfection of the metal surface results from its purely geometrical corrugation. By using the proper coordinate transformation, we reduce the problem of SPP scattering from a rough interface region to the problem of its scattering from a flattened region with effective 1D random impedance. The latter problem is then solved converting the impedance perturbation to the effective potentials in the Schrodinger-like equation. We calculate the radiation pattern for the model of one-dimensional interface roughness and demonstrate its pronounced anisotropy arising due to the interplay

between different geometrical parameters of the interface roughness [3]. The 1D nature of the interface disturbance results in pronounced Anderson localization of the SPP penetrating a rough segment, which most significantly manifests itself in the reflection of the incident surface wave.

- [1] Yu. V. Tarasov, O. M. Stadnyk, N. Kvitka, *Ann. Phys.* **455**, 169378 (2023).
- [2] A. V. Shchegrov, A. A. Maradudin, E. R. Mendez, *Prog. Opt.* **46**, 117 (2004).
- [3] Yu. V. Tarasov, O. M. Stadnyk, *Phys. Rev. B* **108**, 214202 (2023).

CONFORMATIONAL TRANSITIONS IN STIMULI RESPONSIVE COPOLYMER BOTTLEBRUSHES: A MOLECULAR DYNAMICS STUDY

Kristine Haydukivska^{1,2}, *Jarostaw Paturej*^{1,3}

¹Institute of Physics, University of Silesia, Chorzów, Poland

²Institute for Condensed Matter Physics, NASU, Lviv, Ukraine

³Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden, Germany

e-mail: wja4eslawa@icmp.lviv.ua

Stimuli responsive polymers present an intriguing field of research due to their wide range of possible applications and among these macromolecules are bottlebrushes with different types of side chain or diblock copolymer side chains. Developments in synthesis techniques allow to create finely tuned macromolecular architectures. As a result in recent years, a number of different bottlebrushes with different types of side chains have been created. Those structures are particularly interesting as under the influence of stimuli (pH [1, 2, 3], temperature [4, 5, 2] or light [6]) they undergo a reversible conformational transition from worm-like to coil-like state. In addition, a collapse of this type was observed before recent developments produced macromolecules that do not clump together to form aggregates [4, 2]. This makes them interesting for a number of applications, including targeted drug delivery, bioimaging, tissue engineering, bioadhesives, etc.

In this work, we consider a bottlebrush with two chains grafted to each bead of the backbone with two different types of side chains grafted in alternating order. The modeling is done in three-dimensional space using a bead-spring coarse-grained model [7] with beads of size σ and equal mass m . We consider the depth of the potential for yellow to be half that of the other beads regarding all interactions.

We aim to study the influence of architecture on shape crossovers in copolymer bottle brushes in particular length of the backbone by keeping side chains length fixed at $N_s = 20$ beads and backbones $N_b = 50, 100, 150, 200$; as well as considering a constant ratio $N_b/N_s = 5$ and backbones $N_b = 50, 100, 200, 300$. We acknowledge that in this work the transition from bad to good solvent occurs with the temperature increase not decrease as in the experimentally available cases. However since bead spring model is not only simple but also well studied we chose it as a first step to study these conformational phenomena.

- [1] E. W. Kent, E. M. Lewoczko, B. Zhao, *Polym. Chem.* **12**, 265 (2021); <https://doi.org/10.1039/D0PY01466D>.
- [2] M. T. Kelly, E. W. Kent, B. Zhao, *Macromolecules* **55**, 1629 (2022); <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02662>.
- [3] E. W. Kent, D. M. Henn, B. Zhao, *Polym. Chem.* **9**, 5133 (2018); <https://doi.org/10.1039/C8PY01137K>.
- [4] D. M. Henn, W. Fu, S. Mei, C. Y. Li, B. Zhao, *Macromolecules* **50**, 1645 (2017); <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.7b00150>.
- [5] D. M. Henn, J. A. Holmes, E. W. Kent, B. Zhao, *J. Phys. Chem. B* **122**, 7015 (2018); <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b04767>.
- [6] D. M. Henn, C. M. Lau, C. Y. Li, B. Zhao, *Polym. Chem.* **8**, 2702 (2017); <https://doi.org/10.1039/C7PY00279C>.

SPECTROSCOPY OF THE LITHIUM TETRABORATE GLASS CO-DOPED WITH Mn AND Eu

I. I. Kindrat¹, B. V. Padlyak^{1,2}, A. Drzewiecki¹

¹Institute of Physics, University of Zielona Góra, Poland

²Vlokh Institute of Physical Optics, Lviv, Ukraine

The lithium tetraborate glass co-doped with MnO₂ (1.0 mol.%) and Eu₂O₃ (1.0 mol.%) (Li₂B₄O₇:Mn,Eu) was obtained by melt quenching method and characterised by XRD, EPR, optical absorption and photoluminescence (emission, excitation, decay kinetics) techniques [1]. The obtained results were compared with corresponding data for Mn-doped and Eu-doped Li₂B₄O₇ glasses.

The smooth XRD curve was registered and analysed to obtain the local structure details. It was found that the BO₃ triangles, BO₄ tetrahedra and LiO_n ($n = 4 - 7$) units are present in the Li₂B₄O₇:Mn,Eu glass network. The experimental X-band EPR spectra show Mn²⁺(1) signal at $g_{\text{iso}} = 4.29$ without resolved hyperfine structure, Mn²⁺(2) signal at $g_{\text{iso}} = 2.01$ with six components of hyperfine structure resulting from the ⁵⁵Mn isotope nuclei (nuclear spin $I = 5/2$, natural abundance — 100%), and broad Mn²⁺–Mn²⁺ signal around $g \cong 2.0$. The manganese impurity is incorporated into the Li₂B₄O₇:Mn,Eu glass network as isolated Mn²⁺ ($3d^5$) ions in the strongly distorted and weakly distorted octahedral and/or tetrahedral sites as well as Mn²⁺ pairs and small clusters.

The optical absorption spectrum shows a broad intense band at 464 nm attributed to the ⁵E_g(D) → ⁵T_{2g}(D) transition of Mn³⁺ ($3d^4$) ions and weak narrow bands attributed to the ⁷F₀ → ⁵L₆ and ⁷F₀ → ⁵D₂ transitions of Eu³⁺ ($4f^6$) ions. The photoluminescence emission spectra show five narrow bands assigned to the ⁵D₀ → ⁷F_J ($J = 0 - 4$) transitions of Eu³⁺ ions and one broad band assigned to the ⁴T_{1g}(G) → ⁶A_{1g}(S) transition of Mn²⁺ ions. The emission of Eu³⁺ and Mn²⁺ ions is observed in the orange-red spectral range. The photoluminescence excitation spectra show many narrow bands in the UV-green spectral range belonging to Eu³⁺ and Mn²⁺ ions. The photoluminescence decay times of Eu³⁺ and Mn²⁺ ions are in the millisecond time range. The energy transfer processes Eu³⁺ ↔ Mn²⁺, Eu³⁺ → Mn³⁺, and Mn²⁺ → Mn³⁺ in the Li₂B₄O₇:Mn,Eu glass are noticed and discussed.

[1] B. V. Padlyak, I. I. Kindrat, V. T. Adamiv, I. M. Teslyuk, A. Drzewiecki, *Opt. Mater.* **154**, 115782 (2024).

ТОМОГРАФІЯ ТЕМНИХ ВІКІВ І КОСМІЧНОГО СВІТАНКУ В ЛІНІЯХ ГІДРОГЕНУ І ПЕРШИХ МОЛЕКУЛ ЯК ТЕСТ КОСМОЛОГІЧНИХ МОДЕЛЕЙ

Б. Новосядлий¹, Ю. Кулінич¹, Б. Мелех², М. Ціж¹,

А. Рудаковський³, Д. Коваль², П. Копач²

¹Астрономічна обсерваторія, Львівський національний університет імені Івана Франка, Україна

²Кафедра астрофізики, Львівський національний університет імені Івана Франка, Україна

³Інститут теоретичної фізики імені М. Боголюбова НАН України

У доповіді буде висвітлено актуальність, мету та основні завдання проєкту 2023.03/0098 “Томографія Темних віків і Космічного світанку в лініях гідрогену і перших молекул як тест космологічних моделей”, який фінансується Національним фондом досліджень України, а також основні результати 1-го етапу його виконання.

Дослідження реліктового випромінювання та галактичні огляди неба за допомогою сучасних телескопів світу дали унікальну інформацію щодо глобальних параметрів Всесвіту та його великомасштабної структури, але разом з тим вказали на обмеженість можливостей стандартної космологічної моделі з Λ -сталою та холодною темною матерією, так званої Λ CDM моделі, несуперечливо інтерпретувати усю сукупність спостережних даних. Виникла необхідність її розширення складнішими моделями фізичної природи прихованих компонент — темної матерії і темної енергії та сценарію формування зір і галактик. Це в свою чергу вимагає пошуку нових спостережних тестів. Такими, зокрема можуть бути сигнали в лінії 21 см гідрогену та в лініях перших молекул з раннього Всесвіту — епох Темних віків, Космічного світанку та Реіонізації. Метою проекту є дослідити формування глобальних сигналів і спектрів потужності просторових флюктуацій інтенсивностей у лінії 21 см гідрогену та обертово-коливних лініях перших молекул у ранньому Всесвіті на $6 < z < 300$ у різних космологічних моделях. Побудувати моделі спектрального енергетичного розподілу випромінювання перших джерел світла в гало та між ними і оцінити локальні варіації сигналів з епохи Космічного світанку та їх статистичні розподіли по небу на основі моделей утворення перших джерел світла. Основними завданнями проекту є: i) розрахувати томографію раннього Всесвіту в лінії 21 см гідрогену та в лініях перших молекул в діапазоні червоних зміщень 6-300 для різних космологічних моделей, ii) змоделювати спектральну густину енергії перших джерел світла в реалістичних сценаріях їх формування, iii) розрахувати карти та спектри потужності флюктуацій інтенсивності для спектральних густин енергії на різних етапах формування перших зір і галактик, оцінити статистичні характеристики просторових варіації сигналів для розрізненості різних космологічних моделей і сценаріїв формування перших об'єктів.

Результатом 1-го етапу виконання проекту є розрахунок томографії раннього Всесвіту в лінії 21 см гідрогену та в лініях перших молекул в діапазоні червоних зміщень $6 < z < 300$ для космологічних моделей з додатковим нагріванням внаслідок а) самоанігіляції частинок темної матерії, б) розпаду частинок темної матерії, в) загасання первинного магнітного поля.

Автори вдячні Національному фонду досліджень України за фінансову підтримку цього проекту.

RESONANCES IN TWO-DIMENSIONAL QUANTUM SYSTEMS WITH PERTURBED WAVEGUIDES

Sylvia Kondej

Institute of Physics, University of Zielona Góra, Poland

This talk addresses a two-dimensional quantum system characterized by an infinite waveguide of width d and a transversally invariant profile. At a distance ρ , the system is perturbed by a potential defined through the Kato measure. Under specific conditions, we establish the presence of a second-sheet pole in the Hamiltonian's resolvent, corresponding to a resonance at $z(\rho)$.

The resonance exhibits the asymptotic behavior

$$z(\rho) = \mathcal{E}_{\beta;n} + \mathcal{O}\left(\frac{\exp(-\sqrt{2|\mathcal{E}_{\beta;n}|\rho})}{\rho}\right)$$

for large ρ , where $\mathcal{E}_{\beta;n}$ denotes the resonant energy. Additionally, we demonstrate that the imaginary part of $z(\rho)$ satisfies to Fermi's golden rule, which we explicitly derive.

These results provide insight into the resonance phenomena induced by local perturbations in waveguide systems.

QUANTUM MECHANICAL MODELING OF THE INTERACTION OF CARBON-CONTAINING NANOMATERIAL PARTICLES WITH NICKEL IONS

V. V. Tytarenko

Dnipro University of Technology, Dnipro, Ukraine

Nowadays carbon nanomaterials are widely used in material science as fillers for composite materials. The unique physicochemical properties of electrodeposited composite metal films largely depend on the concentration of CNPs in the metal matrix [1, 2]. In order to investigate an electrodeposition mechanism, we have proposed a set of quantum chemical models for formation metal complexes of fullerene (C_{60}), single-wall carbon nanotubes (SWNTs) (C_{48}) and ultra-dispersed diamond particles (UDD) with Ni^{2+} (Fig. 1).

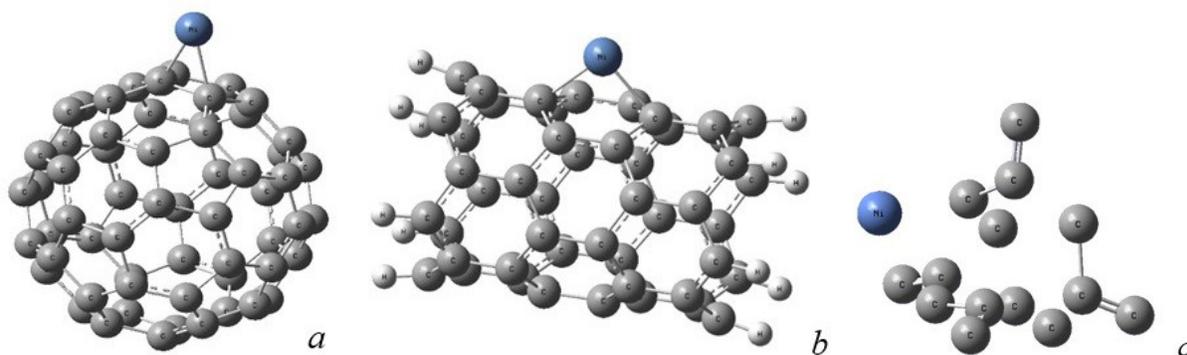


Figure 1. Location of the adsorbed metal ions on the surface of fullerene (C_{60}) (a), SWNT (C_{48}) (b) and UDD (c)

$\Delta W, P\mu V$	Number of adsorbed ions (ion charge)		
	1(+2e)	2(+4e)	3(+6e)
Fullerene (C_{60})	1.907	1.582	0.240
SWNT (C_{48})	2.234	1.909	0.567
UDD	0.200	0.126	-0.114

Table 1. The binding energy of the complex particle UDD-Ni ion depending on the amount of adsorbed ions

Comparison of calculated binding energies of the metal-CNP complexes (Table 1) with the energies of thermal motion has shown that in aqueous solutions of electrolytes, adsorption of Ni ions on the surface of fullerene (C_{60}), SWNT (C_{48}) and UDD is possible with the formation of stable composite carbon metal complexes. Complexes $3Ni^{2+}$ with the UDD have shown the weakest binding energies, thus these complexes are suggested to be not stable.

- [1] G. K. Burkat, T. Fujimura, V. Yu. Dolmatov, E. A. Orlova, M. V. Veretennikova, *Diam. Relat. Mater.* **14**, 1761 (2005); <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2005.08.004>.
 [2] V. V. Tytarenko, V. A. Zabludovsky, E. Ph. Shtapenko, *Metallogr. Microstruct. Anal.* **9**(5), 651 (2020); <https://doi.org/10.1007/s13632-020-00679-6>.

ДИНАМІКА МАЛИХ ФЛУКТУАЦІЙ В КІНЕТИЦІ БОЛЬЦМАНА

О. Соколовський, С. Лягушин

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Україна

e-mail: alexander.i.sokolovsky@gmail.com

В кінетиці Больцмана система однакових частинок описується середніми значеннями чисел заповнення $n_p \equiv \eta_{1p}$ (p — сукупність імпульсу частинки і її внутрішніх квантових чисел). Оператор Гамільтона системи складається з основної частини $\hat{H}_0 = \sum_p \varepsilon_p \hat{n}_p$ і малої взаємодії \hat{H}_1 ($\hat{\eta}_{1p} \equiv \hat{n}_p = a_p^+ a_p$ — оператор числа заповнення). Флуктуації в системі будемо описувати середніми значеннями η_{2p} оператора $\hat{\eta}_{2p} \equiv \hat{n}_p^2$. Нерівноважні стани системи можна досліджувати в методі скороченого опису Боголюбова на основі моделі Пелетмінського–Яценка [1]. Нерівноважний статистичний оператор (СО) кінетики Больцмана $\rho^0(\eta_1)$ в основному наближенні за взаємодією є квазірівноважний, тобто має вигляд

$$\rho_q^0 = e^{\Omega^0 - \sum_p Z_{1p} \hat{n}_p}.$$

Нерівноважний СО кінетики Больцмана СО з урахуванням зазначених флуктуацій $\rho(\eta_1, \eta_2)$ в тому ж наближенні є також квазірівноважний і має вигляд

$$\rho_q = e^{\Omega - \sum_p (Z_{1p} \hat{n}_p + Z_{2p} \hat{n}_p^2)}.$$

При цьому справедливі точні співвідношення $\text{Sp} \rho_q = 1$, $\text{Sp} \rho_q^0 = 1$, $\text{Sp} \rho_q \hat{\eta}_{2p} = \eta_{2p}$, $\text{Sp} \rho_q \hat{\eta}_{1p} = \eta_{1p}$, $\text{Sp} \rho_q^0 \hat{\eta}_{1p} = \eta_{1p}$, які визначають всі величини в СО ρ_q^0 , ρ_q . Повні СО $\rho^0(\eta_1)$, $\rho(\eta_1, \eta_2)$ виражаються через квазірівноважні СО ρ_q^0 , ρ_q відомими з теорії Пелетмінського–Яценка [1] формулами в теорії збурень за взаємодією \hat{H}_1 . Всі середні значення, стосовні кінетики Больцмана, обчислюються з ρ_q^0 правилами Віка. Подібних правил для ρ_q немає оскільки в його експоненті стоїть форма четвертого порядку по операторах a_p , a_p^+ . Нами для подолання цієї проблеми запропоновано обмежитись розглядом кінетики Больцмана з урахуванням динаміки малих флуктуацій, коли величини

$$\eta_{2p} - \text{Sp} \rho_q^0 \hat{\eta}_{2p} = \text{Sp}(\rho_q - \rho_q^0) \hat{\eta}_{2p} \equiv \delta \eta_{2p}$$

малі. На цій основі СО ρ_q знайдено у теорії збурень за степенями $\delta \eta_{2p}$. Після цього обчислення середніх з СО ρ_q зводиться до обчислень середніх з СО ρ_q^0 з використанням правил Віка. У підсумку з урахуванням результатів Пелетмінського–Яценка [1] теорії збурень за малою взаємодією \hat{H}_1 отримано рівняння динаміки малих флуктуацій в кінетиці Больцмана; $\partial_t \eta_{1p} = L_{1p}(\eta_1, \delta \eta_2)$, $\partial_t \delta \eta_{2p} = L_{2p}(\eta_1, \delta \eta_2)$.

[1] А. І. Ахмезер, С. В. Пелетмінський, *Methods of Statistical Physics* (Pergamon Press, Oxford, 1981).

ЕВОЛЮЦІЯ ПОЛЯРИЗОВАНОГО РАДІОВИПРОМІНЮВАННЯ ВІД ЗАЛИШКУ НАДНОВОЇ SN1987A

О. Петрук, В. Бешлей, С. Орландо, М. Мічелі, Ф. Боккіно

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

Астрономічна обсерваторія Національного інституту астрофізики Італії, Палермо, Італія

Залишок наднової SN1987A регулярно спостерігається у різних діапазонах електро-магнітного спектру. Завдяки його відносно близькому розташуванню можна проводити детальний просторовий аналіз карт яскравості. Молодий вік залишка та ці постійні спостереження надають унікальну можливість дослідити магнітне поле навколо зорі-попередниці наднової. У нашому дослідженні

використано масштабні тривимірні магніто-гідродинамічні симуляції, які відтворюють еволюцію SN1987A від початкового вибуху до сучасного стану. Ці симуляції з високою точністю відтворюють криву блиску, десятиліття змін радіозображень та карту поляризації через 30 років після вибуху, що детально узгоджується з даними спостережень. Отож, наша тривимірна чисельна модель стає інструментом дослідження еволюції залишку. Зокрема, ми досліджуємо зміни у структурах векторів поляризації з часом. В цей спосіб виявляємо конфігурацію магнітного поля всередині залишку та досліджуємо його розподіл у навколосоряному середовищі до спалаху наднової, що накладає обмеження на еволюцію зір на пізніх стадіях перед вибухом.

QUANTUM COMPUTATION OF THE GROUND STATE OF THE ISING MODEL

V. M. Tkachuk¹, H. P. Laba²

¹Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

²Lviv Polytechnic National University, Ukraine

We propose a method for studying the ground state of spin systems, specifically the Ising model, on a quantum computer. The method utilizes the Boltzmann operator, which is implemented as a trace over ancillary spins of a certain evolution operator. By applying the Boltzmann operator to a superposition of all possible eigenstates of the spin system in the zero-temperature limit, we obtain the ground state. The method and the corresponding quantum algorithm have been demonstrated for the Ising model.